现代物理基础丛书 64

固体量子场论

史俊杰　刘自信　刘玉芳　著



现代物理基础丛书　64

固体量子场论

史俊杰　刘自信　刘玉芳　著

科 学 出 版 社

北　京

内 容 简 介

本书系统介绍了应用于固体物理的量子场论的一些基本概念和主要理论工具. 其中包括场的量子化、格林函数、费曼图技术、重整化群、规范理论等. 特别是介绍了场论中的一些计算技术及其在固体物理中的重要应用. 包括图形微扰论、运动方程方法、响应函数的计算、电荷输运、自旋输运、量子霍尔体系、拓扑绝缘体以及利用动力学平均场论(及其拓广)来作电子结构计算等.

本书可供物理系高年级本科生、研究生和从事固体物理、材料物理、理论物理研究的科研工作者使用.

图书在版编目(CIP)数据

固体量子场论/史俊杰, 刘自信, 刘玉芳著. —北京: 科学出版社, 2015.3
(现代物理基础丛书; 64)

ISBN 978-7-03-043829-4

Ⅰ. ①固… Ⅱ. ①史… ②刘… ③刘… Ⅲ. ①量子场论 Ⅳ. ①O413.3

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2015) 第 053784 号

责任编辑: 钱 俊 鲁永芳 / 责任校对: 邹慧卿
责任印制: 张 倩 / 封面设计: 陈 敬

科学出版社 出版
北京东黄城根北街 16 号
邮政编码: 100717
http://www.sciencep.com

骏杰印刷有限公司 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2015 年 3 月第 一 版 开本: 720 × 1000 1/16
2015 年 3 月第一次印刷 印张: 28 1/4
字数: 570 000

定价: 158.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换)

前　　言

量子场论方法日益广泛地应用于固体理论中, 一个典型的例子就是超导电性的 BCS 理论的建立, 并且普遍相信量子场论还将是建立高温超导理论所必需的. 在本书第一章的引论中我们较详细地介绍了量子场论的用途.

虽然传统的固体理论书籍往往包含一些场论方法, 但是由于这类书籍的侧重点是在固体物理问题本身上, 所以对场论的思想和方法缺乏全面而系统的论述, 读者也难以从中全面深刻领悟并灵活掌握场论方法. 本书的侧重点在固体中的场论方法, 而涉及的固体物理仅作为场论应用的例子而选择性地加以简略阐述. 正因为这样的目的, 首先系统地论述场论方法的基础, 从传统的正则量子化途径 (算符途径) 到路径积分量子化途径 (泛函积分途径), 详细介绍了一些主要的理论工具和计算技术, 例如, 格林函数、自能函数以及费曼图技术、运动方程方法、重整化群、动力学平均场论等. 本书也介绍了场论在固体理论中的几种最重要的运用, 其中包括了响应函数的计算、电荷输运和自旋输运, 特别是场论与广泛运用的局域近似下的密度泛函理论的结合 (LDA+DMFT) 来作材料的电子结构运算等. 然而限于篇幅, 我们主要考虑那些在固体理论中应用相对广泛的内容.

本书第一章介绍了场的正则量子化方法, 讨论了量子场与粒子、准粒子之间的关系, 并介绍了固体中的几种基本的粒子和准粒子. 第二章和第三章在算符途径中分别介绍了零温及有限温度下的图形微扰方法. 第四章则介绍了非平衡问题中的图形技术. 第五章和第六章分别论述了场论方法在动力学关联、电荷输运和自旋输运中的运用. 第七章论述了场的路径积分量子化方法并将该方法用于建立 BCS 超导电性理论. 第八章论述了应用于固体相变以及量子输运的重整化群方法. 第九章讨论了研究强关联体系的图形赝粒子技术、动力学平均场论 (及其拓广) 和利用动力学平均场论来进行电子能带结构计算并初步介绍了强关联体系的规范场论.

本书的论述尽可能详尽, 其中一些数学准备也以附录的形式给出, 以便让初次接触该领域的读者 (包括固体物理专业和材料物理专业研究生) 也能够容易掌握相关内容. 正因为如此, 我们只给出了一些必要的参考文献.

本书由北京大学史俊杰教授和河南师范大学刘自信教授、刘玉芳教授共同完成. 本书得到河南省高校科技创新团队支持计划 (131RTSTHN016)、2012 年度河南

省科技创新人才计划 (124200510013)、国家重点基础研究发展计划 (973 计划) 项目 (2012CB619304)、国家自然科学基金面上项目 (11474012, 11274096) 资助.

由于作者水平有限, 不妥之处敬请读者指正.

作　者

2014 年 11 月

目　　录

第一章　粒子、准粒子和量子场

第一节　引　　论

量子场论能够以一种粒子与波动的统一观点来看待各种 "粒子"(包括光子等), 首先可以把粒子与某种经典的 (即未量子化的)"**场**" 相联系. 例如, 与非相对论性粒子相联系的场是满足薛定谔方程的场, 与相对论性粒子相对应的场满足相对性场方程 (其形式视粒子自旋而定). 其中与自旋为 1 的光子相对应的是满足麦克斯韦 (Maxwell) 方程的电磁场. 对这些经典场进行量子化, 就能得到相应的量子场.

量子场论是场的量子理论, 它把粒子看成场的量子 (例如, 光子就被看成电磁场的量子), 从而建立起粒子与场的对应. 粒子的性质以及粒子间的相互作用可由场的性质以及场之间的相互作用来反映. 也就是说量子场论可以描述粒子的性质以及粒子之间的相互作用 (粒子的产生、消灭和相互转变等).

这样, 量子场论成为了基本粒子物理最重要的解析工具. 然而量子场论的应用绝不仅限于此. 那些具有 "粒子" 行为的对象, 如凝聚态物理中的 "准粒子"(即元激发, 其行为类似于在介质中运动并具有一定能量动量的粒子, 如声子 (phonon) 等), 也可以用场论方法来研究. 在量子场论的自身发展过程中, 逐渐显示出它有许多适合于对量子多粒子系统中的现象作分析的特点. 这始于福克 (Fock) 表象理论, 它使得量子场论能够为那些状态能由一组数列来分类的量子体系提供恰当的语言. 量子场论还给我们提供了一些精美的工具, 它们是如此强有力, 使得场论方法具有巨大的普适性. 例如, 我们可以从统一的观点和方法去研究：从夸克、粒子到准粒子的行为, 从磁性金属中的相变到早期宇宙中的相变, 从量子体系到某些经典体系以及某些宏观与微观客体共存的体系等. 人们也找到了量子场论与统计力学之间的密切联系：一个 D 维体系的量子场论能够表述成一个 $D+1$ 维体系的统计力学的理论. 今天量子场论方法已被广泛应用于包括固体物理在内的多门学科中.

至于对经典波动场进行量子化的方法, 主要有正则量子化途径 (或称算符途径) 和路径积分量子化途径 (或称泛函积分途径). 我们在本章将以非相对论性粒子体系为例来说明正则量子化途径的基本思想和方法, 并在第七章中介绍路径积分量子化途径.

下面将采用如下约定：设场所处的空间为 d 维, 时空中任意点的坐标矢量 x 的 (逆变) 分量为 $x^\mu=(x^0,x^1,\cdots,x^d)=(t,\underline{x})$, 其中, $x^0=t$, 希腊字母指标 $\mu=$

$0, 1, \cdots, d$, 而反映空间分量的指标将用拉丁字母表示, 如 $i = 1, 2, \cdots, d$. 导数 $\partial_\mu \equiv \frac{\partial}{\partial x^\mu} = \left(\frac{\partial}{\partial t}, \frac{\partial}{\partial x^1}, \cdots, \frac{\partial}{\partial x^d}\right) = \left(\frac{\partial}{\partial t}, \frac{\partial}{\partial \underline{x}}\right) = \left(\frac{\partial}{\partial t}, \boldsymbol{\nabla}\right)$. **通常不加特别指出时, $\boldsymbol{d} = \mathbf{3}$**. $d+1$ 维 Minkowshi 时空的度规张量为如下对角矩阵：$g_{\mu\nu} = \mathrm{diag}(1, -1, \cdots, -1)$. 这样可通过度规 $g_{\mu\nu}$ 及其逆矩阵 $g^{\mu\nu}$ 来实现时空指标的升降. 例如, 坐标矢量 x 的 (协变) 分量 $x_\mu = g_{\mu\nu} x^\nu = (t, -\underline{x})$, $\partial^\mu = g^{\mu\nu}\partial_\nu = \left(\frac{\partial}{\partial t}, -\boldsymbol{\nabla}\right)$ 等 (其中重复指标自动求和). 另外, **我们在不加说明时总采用自然单位制**：$\hbar = c = 1$.

第二节　经典场的正则量子化方法

一、经典场的拉格朗日形式

体系的拉格朗日函数 (简称**拉氏函数**) $L(t) = T - V$ 是提取该体系物理信息的基本理论工具 (T, V 分别为体系的动能和势能), 例如, 通常我们能从拉氏函数求出体系的运动方程. 对于经典场这种体系, 拉氏函数可以借助于**拉氏密度**$\mathcal{L}$ 来表达为 $L(t) \equiv \int \mathrm{d}^d x \mathcal{L}$. 设拉氏密度 $\mathcal{L}$ 是场量 $\varphi_a(\underline{x}, t) \equiv \varphi_a(x)$ (有时简记为 φ_a) 及其导数 $\partial_\mu \varphi_a$ 的函数 $\mathcal{L} = \mathcal{L}(\varphi_a, \partial_\mu \varphi_a)$. 其中, 下标 $a = 1, 2, \cdots, n$, 它可以表示不同场量或者同一个场量的不同分量. 由作用量原理可导出如下**场的运动方程** (**拉氏方程**) (参见附录式 (1A.2.6))：

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_a} - \partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_\mu \varphi_a} = 0 \tag{1.2.1}$$

其中, 重复的时空指标自动求和 (**爱因斯坦求和规约**).

二、经典场的哈密顿形式

将场量 $\varphi_a(x)$ 视为正则坐标, 定义和它共轭的**正则动量**为

$$\pi_a(x) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}_a} \tag{1.2.2}$$

其中, $\dot{\varphi}_a = \frac{\partial \varphi_a}{\partial t} = \partial_t \varphi_a$. 我们目前仅考虑 $\pi_a(x) \neq 0$(即无约束) 的情形. 这种情形下, 可以通过勒让德变换引入如下的场的哈密顿密度 (简称**哈氏密度**) $\mathcal{H}$ (参见附录式 (1B.7))：

$$\mathcal{H} \equiv \sum_a \pi_a \dot{\varphi}_a - \mathcal{L} \tag{1.2.3}$$

而场的 **(总) 哈密顿**为

$$H \equiv \int \mathrm{d}^d x \mathcal{H} \tag{1.2.4}$$

从拉氏运动方程 (1.2.1) 以及式 (1.2.2) 和式 (1.2.3) 可以得出场的运动方程 (哈密顿正则运动方程). 注意在式 (1.2.3) 中必须把 $\mathcal{H}$ 和 $\dot{\varphi}_a$ 理解成 φ_a, π_a 和 $\boldsymbol{\nabla}\varphi_a$ 的函数. 由该式可得

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \pi_a} = \dot{\varphi}_a + \pi_b \frac{\partial \dot{\varphi}_b}{\partial \pi_a} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}_b} \frac{\partial \dot{\varphi}_b}{\partial \pi_a} = \dot{\varphi}_a$$

其中, 重复指标自动求和. 因

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \varphi_a} &= \pi_b \frac{\partial \dot{\varphi}_b}{\partial \varphi_a} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_a} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}_b} \frac{\partial \dot{\varphi}_b}{\partial \varphi_a} = -\frac{\partial}{\partial x^\mu} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_\mu \varphi_a} \\ &= -\dot{\pi}_a - \frac{\partial}{\partial x^i} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_i \varphi_a}\end{aligned}$$

其中, 第二等式利用了拉氏方程. 又因有

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \left(\dfrac{\partial \varphi_a}{\partial x^i}\right)} = \pi_b \frac{\partial \dot{\varphi}_b}{\partial \partial_i \varphi_a} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_i \varphi_a} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}_b} \frac{\partial \dot{\varphi}_b}{\partial \partial_i \varphi_a} = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_i \varphi_a}$$

故有

$$\dot{\pi}_a = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \varphi_a} + \partial_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \partial_i \varphi_a} \tag{1.2.5}$$

它连同

$$\dot{\varphi}_a = \frac{\partial H}{\partial \pi_a} \tag{1.2.6}$$

构成**场的正则运动方程**.

三、经典场的正则量子化

经过量子化, 经典场量就会成为算符 (用符号 ^ 标记). 在无约束的情形, 经典场的正则量子化方法如下.

(1) 对正则变量 (即正则坐标和正则动量) 施加如下**等时量子化关系**:

$$[\hat{\varphi}_a(\underline{x}, t), \hat{\varphi}_b(\underline{y}, t)]_\mp = [\hat{\pi}_a(\underline{x}, t), \hat{\pi}_b(\underline{y}, t)]_\mp = 0$$

$$[\hat{\varphi}_a(\underline{x}, t), \hat{\pi}_b(\underline{y}, t)]_\mp = \mathrm{i}\delta^d(\underline{x} - \underline{y}) \tag{1.2.7}$$

其中, 有下标 − 号的对易子用于玻色子场; 有 + 号的反对易子用于费米子场; 若无正负下标, $[\cdots]$ 均理解成对易子. 此外, 费米子场总是和玻色子场对易. 场量和它共轭的动量之间的非零关系式表明它们现在已经是算符: **场算符**, 即**量子场**. 此时作为场量的函数的任何量 (如场的哈氏密度及总哈密顿) 也是算符.

(2) 量子场满足如下的**海森伯运动方程**:

$$\partial_t \hat{\varphi}_a(\underline{x}, t) = \mathrm{i}[\hat{H}, \hat{\varphi}_a(\underline{x}, t)]$$

$$\partial_t \hat{\pi}_a(\underline{x}, t) = \mathrm{i}[\hat{H}, \hat{\pi}_a(\underline{x}, t)] \tag{1.2.8}$$

其中

$$\hat{H} = \int \mathrm{d}^d x \hat{\mathcal{H}} \tag{1.2.9}$$

是场的总哈密顿. 方程组 (1.2.8) 不是别的, 正是场的**正则运动方程的算符形式**. 虽然无论对玻色子场或是费米子场, 方程组 (1.2.8) 均成立, 但我们仅在玻色子场情形下来验证此结论:

$$\begin{aligned}
\partial_t \hat{\varphi}_a(\underline{x}, t) &= \mathrm{i}[\hat{H}, \hat{\varphi}_a(\underline{x}, t)] = \mathrm{i}\int \mathrm{d}^d y [\hat{\mathcal{H}}(\underline{y}, t), \hat{\varphi}_a(\underline{x}, t)] \\
&= \mathrm{i}\int \mathrm{d}^d y \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \hat{\pi}_b(\underline{y}, t)} [\hat{\pi}_b(\underline{y}, t), \hat{\varphi}_a(\underline{x}, t)] \\
&= \mathrm{i}\int \mathrm{d}^d y \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \hat{\pi}_b(\underline{y}, t)} (-\mathrm{i})\delta_{ab}\delta^d(\underline{x} - \underline{y}) \\
&= \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \hat{\pi}_a(\underline{x}, t)}
\end{aligned} \tag{1.2.10}$$

上述推导中, 我们利用了公式

$$[\hat{A}, f(\hat{B})] = f'(\hat{B})[\hat{A}, \hat{B}]$$

其中, $\hat{A}, \hat{B}$ 都与 $[\hat{A}, \hat{B}]$ 对易.

$$\begin{aligned}
\partial_t \hat{\pi}_a(\underline{x}, t) &= \mathrm{i}[\hat{H}, \hat{\pi}_a(\underline{x}, t)] = \mathrm{i}\int \mathrm{d}^d y [\hat{\mathcal{H}}(\underline{y}, t), \hat{\pi}_a(\underline{x}, t)] \\
&= \mathrm{i}\int \mathrm{d}^d y \left\{ \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \hat{\varphi}_b(\underline{y}, t)} [\hat{\varphi}_b(\underline{y}, t), \hat{\pi}_a(\underline{x}, t)] + \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \partial_{y^i} \hat{\varphi}_b(\underline{y}, t)} [\partial_{y^i} \hat{\varphi}_b(\underline{y}, t), \hat{\pi}_a(\underline{x}, t)] \right\} \\
&= \mathrm{i}\int \mathrm{d}^d y \left\{ \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \hat{\varphi}_b(\underline{y}, t)} \mathrm{i}\delta_{ab}\delta^d(\underline{x} - \underline{y}) + \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \partial_{y^i} \hat{\varphi}_b(\underline{y}, t)} \mathrm{i}\delta_{ab}\partial_{y^i}\delta^d(\underline{x} - \underline{y}) \right\} \\
&= -\frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \hat{\varphi}_a(\underline{x}, t)} + \partial_i \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \partial_i \hat{\varphi}_a(\underline{x}, t)}
\end{aligned} \tag{1.2.11}$$

显然式 (1.2.10) 和式 (1.2.11) 正是式 (1.2.5) 和式 (1.2.6) 对应的量子化 (算符) 形式.

第三节 非相对论性粒子体系的场论描述

一、薛定谔场方程

量子力学 (QM) 中一个三维空间中的非相对论性粒子满足**薛定谔方程**(简称 S-

方程). 设电子处于外势场 $V(\underline{x})$ 中, 则有

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi(\underline{x},t)=\left[-\frac{1}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2+V(\underline{x})\right]\psi(\underline{x},t) \tag{1.3.1}$$

为简单我们暂未计及自旋指标. 其中, 波函数 $\psi(\underline{x},t)$ 代表 t 时刻在 $\underline{x}$ 处出现这个粒子的概率幅. 假设我们能求解相应的**能量本征方程**:

$$\left[-\frac{1}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2+V(\underline{x})\right]\psi_\lambda(\underline{x})=E_\lambda\psi_\lambda(\underline{x}) \tag{1.3.2}$$

这至少对于某些特定的势函数能做到, 我们把本征函数 $\psi_\lambda(\underline{x})$ 或它对应的含时波函数 $\psi_\lambda(t,\underline{x})=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_\lambda t}\psi_\lambda(\underline{x})$ 称为 **S-方程的模解**.

例如, **对于自由粒子** $(V(\underline{x})=0)$, 有正交归一的本征函数解:

$$\psi_{\underline{p}}(\underline{x})=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{p}\cdot\underline{x}}\Big/\sqrt{V} \tag{1.3.3}$$

其中, V 是箱归一化体积, 并且由于此时它也是动量本征函数, 故下标 λ 可改用 $\underline{p}$ 来表示. 粒子动量满足关系式:

$$E_{\underline{p}}=\underline{p}^2/(2m) \tag{1.3.4}$$

进而也可以得到 S-方程的含时波函数:

$$\psi_{\underline{p}}(\underline{x},t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_{\underline{p}}t-\underline{p}\cdot\underline{x})}\Big/\sqrt{V} \tag{1.3.5}$$

如果不采用**箱归一化**而采用**连续归一化**, 则应将 $1\Big/\sqrt{V}$ 换成 $1\Big/\sqrt{(2\pi)^3}$.

上述量子力学的 S-方程是一个单粒子方程, 它既不能描述多个粒子, 更不能描述粒子的产生和消灭. 但从量子场论的观点来看, 我们可以将 $\psi(t,\underline{x})$ 理解成一种"波动场", 薛定谔方程 (1.3.1) 被视为该波动场的**场方程**, 把这种场量子化后, 粒子将作为场的量子而出现. 这就像麦克斯韦波动方程被视为电磁场的场方程, 量子化后场的量子就是光子那样.

二、薛定谔场方程的量子化

易验证方程 (1.3.1) 是能由如下拉氏密度导出的拉氏方程:

$$\mathcal{L}=\psi^+(x)\left\{\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}-\left[-\frac{1}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2+V(\underline{x})\right]\right\}\psi(x) \tag{1.3.6}$$

定义和正则坐标 $\psi(x)$ 共轭的正则动量为

$$\pi(x)=\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\psi}}=\mathrm{i}\psi^+(x) \tag{1.3.7}$$

场的哈氏密度 $\mathcal{H}$ 为

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &\equiv \pi(x)\dot{\psi}(x) - \mathcal{L} \\ &= \psi^{+}(x)\left[-\frac{1}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2 + V(\underline{x})\right]\psi(x)\end{aligned} \tag{1.3.8}$$

由此知场的总哈密顿 H 为

$$H = \int \mathrm{d}^3x\mathcal{H} = \int \mathrm{d}^3x\psi^{+}(x)\left[-\frac{1}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2 + V(\underline{x})\right]\psi(x) \tag{1.3.9}$$

为了把经典场量子化, 我们可以对正则变量施加如下等时量子化关系:

$$\begin{cases}[\hat{\psi}(\underline{x},t),\hat{\psi}(\underline{y},t)]_{\mp} = [\hat{\psi}^{+}(\underline{x},t),\hat{\psi}^{+}(\underline{y},t)]_{\mp} = 0 \\ [\hat{\psi}(\underline{x},t),\hat{\psi}^{+}(\underline{y},t)]_{\mp} = \delta^3(\underline{x}-\underline{y})\end{cases} \tag{1.3.10}$$

量子化后的场算符 $\hat{\psi}(x)$ 满足的是海森伯运动方程:

$$\partial_t\hat{\psi}(\underline{x},t) = \mathrm{i}[\hat{H},\hat{\psi}(\underline{x},t)], \quad \partial_t\hat{\pi}(\underline{x},t) = \mathrm{i}[\hat{H},\hat{\pi}(\underline{x},t)] \tag{1.3.11}$$

其中, $\hat{H}$ 是场被量子化 (二次量子化) 后的哈密顿. 利用式 (1.3.8) 和式 (1.3.11) 可以验证这个海森伯运动方程正是**算符形式的薛定谔方程**, 它和式 (1.3.1) 有相同的形式, 区别在于此时场量不是经典场而是算符形式的量子场, 即我们已将经典的薛定谔方程进行了量子化.

显然场算符可以写成为 S-方程的模解的叠加:

$$\hat{\psi}(\underline{x},t) = \sum_{\lambda}\psi_{\lambda}(\underline{x},t)\hat{a}_{\lambda} = \sum_{\lambda}\psi_{\lambda}(\underline{x})\hat{a}_{\lambda}(t) \tag{1.3.12}$$

其中

$$\hat{a}_{\lambda}(t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_{\lambda}t}\hat{a}_{\lambda} \tag{1.3.12a}$$

注意: $\hat{a}_{\lambda}$ 与 $t,\underline{x}$ 无关. 取式 (1.3.12) 的厄米共轭, 有

$$\hat{\psi}^{+}(\underline{x},t) = \sum_{\lambda}\psi_{\lambda}^{*}(\underline{x},t)\hat{a}_{\lambda}{}^{+} = \sum_{\lambda}\psi_{\lambda}^{*}(\underline{x})\hat{a}_{\lambda}^{+}(t) \tag{1.3.13}$$

场方程和场算符还常用另一种等价的表述形式: 将本征方程

$$\left[-\frac{1}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2 + V(\underline{x})\right]\hat{\psi}(\underline{x}) = E\hat{\psi}(\underline{x}) \tag{1.3.13a}$$

视为场算符 $\hat{\psi}(\underline{x})$ 满足的场方程. 将场算符按模解 $\psi_{\lambda}(\underline{x})$ 展开可得

$$\hat{\psi}(\underline{x}) = \sum_{\lambda}\psi_{\lambda}(\underline{x})\hat{a}_{\lambda} \tag{1.3.14}$$

$$\hat{\psi}^+(\underline{x}) = \sum_\lambda \psi_\lambda^*(\underline{x})\hat{a}_\lambda{}^+ \tag{1.3.14a}$$

$\hat{\psi}(t,\underline{x})$ 和 $\hat{\psi}(\underline{x})$ 可分别理解成海森伯绘景和薛定谔绘景中的场算符 (参见第二章第二节). 由于 $\hat{\psi}(x)$ 是场算符, 而 ψ_λ 是一个函数, 所以 $\hat{a}_\lambda$, $\hat{a}_\lambda^+$ 应是算符. 由式 (1.3.10) 及场模解所满足的正交归一关系与完备性关系:

$$\int \mathrm{d}^3x\psi_\lambda^*(\underline{x},t)\psi_{\lambda'}(\underline{x},t) = \int \mathrm{d}^3x\psi_\lambda^*(\underline{x})\psi_{\lambda'}(\underline{x}) = \delta_{\lambda\lambda'} \tag{1.3.15}$$

$$\sum_\lambda \psi_\lambda(\underline{x},t)\psi_\lambda^*(\underline{x},t') = \sum_\lambda \psi_\lambda(\underline{x})\psi_\lambda^*(\underline{x}') = \delta^3(\underline{x}-\underline{x}') \tag{1.3.16}$$

可以导出

$$[\hat{a}_\lambda, \hat{a}_{\lambda'}]_\mp = [\hat{a}_\lambda^+, \hat{a}_{\lambda'}^+]_\mp = 0 \tag{1.3.17}$$

$$[\hat{a}_\lambda, \hat{a}_{\lambda'}^+]_\mp = \delta_{\lambda\lambda'} \tag{1.3.18}$$

其中, 下标 $-$ 是对玻色子而言的; 下标 $+$ 是对费米子而言的. 对于连续角标情形, $\delta_{\lambda\lambda'}$ 应理解成狄拉克 δ 函数.

定义算符:

$$\hat{N}_\lambda = \hat{a}_\lambda^+\hat{a}_\lambda \tag{1.3.19}$$

易知有

$$[\hat{N}_\lambda, \hat{a}_\lambda] = -\hat{a}_\lambda \tag{1.3.20}$$

$$[\hat{N}_\lambda, \hat{a}_\lambda^+] = \hat{a}_\lambda^+ \tag{1.3.21}$$

式 (1.3.20) 及式 (1.3.21) 分别是消灭算符和产生算符的特征性关系 (对玻色子和费米子均适用). 由此可知满足式 (1.3.17) 及式 (1.3.18) 的算符 $\hat{a}_\lambda$ 是对应模 λ 的粒子的**消灭算符**, $\hat{a}_\lambda^+$ 是对应模 λ 中的粒子的**产生算符**, $\hat{N}_\lambda$ 是模 λ 中的粒子数算符.

三、粒子态与场算符

引入**无粒子真空态**$|0\rangle$, 它有如下性质:

$$\hat{a}_\lambda|0\rangle = 0 \quad (\forall\lambda) \tag{1.3.22}$$

其中, $\forall\lambda$ 表示对所有的 λ. 借助于真空态和产生算符, 可构造具有任何粒子数的态, 如单粒子态:

$$|1_\lambda\rangle = \hat{a}_\lambda^+|0\rangle \tag{1.3.23}$$

二粒子态:

$$|1_\lambda, 1_{\lambda'}\rangle \equiv |2_{\lambda,\lambda'}\rangle = \begin{cases} \hat{a}_\lambda^+\hat{a}_{\lambda'}^+|0\rangle & (\lambda \neq \lambda') \\ \dfrac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}_\lambda^+)^2|0\rangle & (\lambda = \lambda') \end{cases} \tag{1.3.24}$$

N 粒子态:

$$|n_1, n_2, \cdots, n_r\rangle = \frac{(\hat{a}_1^+)^{n_1}(\hat{a}_2^+)^{n_2}\cdots(\hat{a}_r^+)^{n_r}}{\sqrt{n_1!n_2!\cdots n_r!}}|0\rangle \tag{1.3.25}$$

以后为了符号的简化, 我们有时也用下标i表示模式i. 这样 $\hat{a}_1^+$ 表示模式 1(能量动量分别为 $E_1, \underline{p}_1$) 中的粒子的产生算符, n_1 表示处于模 1 的粒子数等. 其总粒子数为 $N = n_1 + n_2 + \cdots + n_r$. 对于玻色子体系, $n_i \geqslant 0$, 但对于费米子体系, 由于泡利不相容原理, $n_i = 0$ 或 1.

由真空态构成的希尔伯特空间、单粒子态构成的希尔伯特空间、二粒子态构成的希尔伯特空间 $\cdots\cdots N$ 粒子态构成的希尔伯特空间 $\cdots\cdots$ 所构成的直和就称为 **Fock 空间**.

对于玻色子, 有

$$\begin{aligned}\hat{a}_i|n_1, n_2, \cdots, n_i, \cdots\rangle &= \sqrt{n_i}|n_1, n_2, \cdots, n_i - 1, \cdots\rangle \\ \hat{a}_i^+|n_1, n_2, \cdots, n_i, \cdots\rangle &= \sqrt{n_i + 1}|n_1, n_2, \cdots, n_i + 1, \cdots\rangle\end{aligned} \tag{1.3.26}$$

对于费米子, 有

$$\begin{aligned}\hat{a}_i|n_1, n_2, \cdots, n_i, \cdots\rangle &= \theta_i\sqrt{n_i}|n_1, n_2, \cdots, 1 - n_i, \cdots\rangle \\ \hat{a}_i^+|n_1, n_2, \cdots, n_i, \cdots\rangle &= \theta_i\sqrt{1 - n_i}|n_1, n_2, \cdots, 1 - n_i, \cdots\rangle\end{aligned} \tag{1.3.27}$$

其中, 相因子 θ_i 可取为

$$\theta_i = (-1)^{\nu_i}, \quad \nu_i = \sum_{j=1}^{i-1} n_j \tag{1.3.28}$$

场算符 $\hat{\psi}^+(\underline{x}, t)$ 和 $\hat{\psi}(\underline{x}, t)$ 可解释为在 t 时刻在位置 $\underline{x}$ 处粒子的产生和消灭算符. 事实上由式 (1.3.12)、式 (1.3.13) 以及式 (1.3.5) (自由粒子情形), 可以看出它们是通过对粒子的产生和消灭算符 $\hat{a}_i^+$, $\hat{a}_i$ 作傅里叶变换而得到的**时空表象中的产生和消灭算符**.

现在来看场算符与波函数的联系. 如下定义函数:

$$\psi_1(\underline{x}, t) \equiv \langle 0|\hat{\psi}(\underline{x}, t)|\psi_1\rangle \tag{1.3.29}$$

可视为单粒子薛定谔波函数, 其中, 单粒子态 $|\psi_1\rangle \equiv |1\rangle$. 事实上, 若考察单粒子态

$$|\psi_1\rangle = \int \mathrm{d}^3x C(\underline{x}, t)\hat{\psi}^+(\underline{x}, t)|0\rangle \tag{1.3.30}$$

其中, $C(\underline{x}, t)$ 是普通函数. 按量子力学的谱分解原理, $\hat{\psi}^+(\underline{x}, t)|0\rangle$ 前的系数的模方 $|C(\underline{x}, t)|^2$ 是在 t 时刻在位置 $\underline{x}$ 处找到粒子的概率密度, 即起着波函数模方同样的作用. 在式 (1.3.30) 两端同乘以 $\langle 0|\hat{\psi}(\underline{y}, t)$, 易得

$$C(\underline{y}, t) = \langle 0|\hat{\psi}(\underline{y}, t)|\psi_1\rangle \tag{1.3.31}$$

这表明式 (1.3.29) 的定义符合单粒子波函数的玻恩统计解释, 加之很容易验证 $\psi_1(\underline{x},t)$ 满足薛定谔方程. 所以如上定义的 $\psi_1(\underline{x},t)$ 的确是单粒子波函数. 类似可定义多粒子波函数. 例如, 如下定义的函数就是二粒子波函数:

$$\psi_2(\underline{x},\underline{y},t) = \langle 0|\hat{\psi}(\underline{x},t)\hat{\psi}(\underline{y},t)|\psi_2\rangle = \pm\psi_2(\underline{y},\underline{x},t) \tag{1.3.32}$$

其中, $|\psi_2\rangle \equiv |2\rangle$ 为二粒子态, 对于费米子, 式 (1.3.32) 取负号.

N 粒子含时波函数为

$$\psi_N(\underline{x}_1,\underline{x}_2,\cdots,\underline{x}_N,t) = \langle 0|\hat{\psi}(\underline{x}_1,t)\hat{\psi}(\underline{x}_2,t)\cdots\hat{\psi}(\underline{x}_N,t)|\psi_N\rangle \tag{1.3.33}$$

不含时的 N 粒子波函数 (能量本征函数) 为

$$\psi_N(\underline{x}_1,\underline{x}_2,\cdots,\underline{x}_N) = \langle 0|\hat{\psi}(\underline{x}_1)\hat{\psi}(\underline{x}_2)\cdots\hat{\psi}(\underline{x}_N)|\psi_N\rangle \tag{1.3.34}$$

显然由上式可知

$$|\underline{x}_1,\underline{x}_2,\cdots,\underline{x}_N\rangle = \hat{\psi}^+(\underline{x}_N)\hat{\psi}^+(\underline{x}_{N-1})\cdots\hat{\psi}^+(\underline{x}_1)|0\rangle \tag{1.3.35}$$

四、力学量和粒子之间的相互作用

表示可观测量的算符可借助于产生和消灭算符 (或借助场算符) 来表示. 例如:

(1) **粒子数密度算符**为

$$\hat{n}(\underline{x},t) \equiv \hat{\psi}^+(\underline{x},t)\hat{\psi}(\underline{x},t) = \sum_{\lambda,\lambda'}\psi^*_\lambda(\underline{x},t)\psi_{\lambda'}(\underline{x},t)\hat{a}^+_\lambda\hat{a}_{\lambda'} \tag{1.3.36}$$

(2) **总粒子数算符**为

$$\hat{N} \equiv \int \mathrm{d}^3x\hat{n}(\underline{x},t) = \int \mathrm{d}^3x\hat{\psi}^+(\underline{x},t)\hat{\psi}(\underline{x},t) = \sum_\lambda \hat{a}^+_\lambda\hat{a}_\lambda \tag{1.3.37}$$

(3) **总哈密顿**为

$$\hat{H} = \int \mathrm{d}^3x\hat{\psi}^+(x)\hat{H}_{\mathrm{QM}}\hat{\psi}(x) = \sum_{\lambda,\lambda'}\hat{a}^+_\lambda\hat{a}_{\lambda'}\langle\psi_\lambda|\hat{H}_{\mathrm{QM}}|\psi_{\lambda'}\rangle = \sum_\lambda E_\lambda\hat{a}^+_\lambda\hat{a}_\lambda \tag{1.3.38}$$

其中, $\hat{H}_{\mathrm{QM}} \equiv -\dfrac{1}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2 + V(\underline{x})$ 为量子力学 (QM) 中的哈密顿算符 (即**一次量子化形式**的哈密顿算符), 并且利用了式 (1.3.8) 和式 (1.3.2).

(4) **总动量**(参见附录式 (1B.8)) 为

$$\underline{\hat{P}} = \int \mathrm{d}^3x(-1)\hat{\pi}(x)\boldsymbol{\nabla}\hat{\psi}(x) = \int \mathrm{d}^3x\hat{\psi}^+(x)\underline{\hat{p}}_{\mathrm{QM}}\hat{\psi}(x)$$

$$= \sum_{\lambda,\lambda'} \hat{a}^+_\lambda \hat{a}_{\lambda'} \langle \psi_\lambda | \hat{\underline{p}}_{\text{QM}} | \psi_{\lambda'} \rangle = \sum_\lambda \underline{p}_\lambda \hat{a}^+_\lambda \hat{a}_\lambda \tag{1.3.39}$$

其中, $\hat{\underline{p}}_{\text{QM}} = -\mathrm{i}\boldsymbol{\nabla}$ 是量子力学中的一次量子化形式的动量算符. 式 (1.3.38) 和式 (1.3.39) 表明将 $\hat{N}_\lambda = \hat{a}^+_\lambda \hat{a}_\lambda$ 视为模 λ 的粒子数算符的合理性.

由以上可以看出, 对于量子力学中的单粒子算符的和 $\sum\limits_i f(\hat{\underline{x}}_{i\text{QM}}, \hat{\underline{p}}_{i\text{QM}})$ (其中 $\hat{\underline{x}}_{i\text{QM}}$ 和 $\hat{\underline{p}}_{i\text{QM}}$ 是量子力学中第 i 个粒子的坐标算符和动量算符), 其对应的场论形式 (人们常称为**二次量子化形式**) 为

$$\sum_i f(\hat{\underline{x}}_{i\text{QM}}, \hat{\underline{p}}_{i\text{QM}}) \to \int \mathrm{d}^3x \hat{\psi}^+(x) f(\underline{x}, -\mathrm{i}\boldsymbol{\nabla}) \hat{\psi}(x) = \sum_{\lambda\lambda'} f_{\lambda\lambda'} \hat{a}^+_\lambda \hat{a}_{\lambda'} \tag{1.3.40}$$

其中

$$f_{\lambda\lambda'} = \langle \psi_\lambda | f(\hat{\underline{x}}_{\text{QM}}, \hat{\underline{p}}_{\text{QM}}) | \psi_{\lambda'} \rangle = \int \mathrm{d}^3x \psi^*_\lambda(x) f(\underline{x}, -\mathrm{i}\boldsymbol{\nabla}) \psi_{\lambda'}(x) \tag{1.3.41}$$

不难验证式 (1.3.36) 正是 (一次量子化中的) 粒子数密度

$$\hat{n}^{\text{QM}}(\underline{x}) = \sum_j \delta(\underline{x} - \underline{x}_j) \tag{1.3.41a}$$

的二次量子化形式.

现考虑粒子之间的相互作用, 常见的有粒子间的对称的两两相互作用势:

$$V_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(\underline{x}_i - \underline{x}_j) \tag{1.3.42}$$

在场论中, 它对应的算符为

$$\begin{aligned} \hat{V}_{\text{int}} &= \frac{1}{2} \int \mathrm{d}^3x \mathrm{d}^3y \hat{\psi}^+(\underline{x}, t) \hat{\psi}^+(\underline{y}, t) V(\underline{x} - \underline{y}) \hat{\psi}(\underline{y}, t) \hat{\psi}(\underline{x}, t) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\lambda\beta\gamma\delta} V_{\lambda\beta\gamma\delta} \hat{a}^+_\lambda \hat{a}^+_\beta \hat{a}_\delta \hat{a}_\gamma \end{aligned} \tag{1.3.43}$$

其中

$$\begin{aligned} V_{\lambda\beta\gamma\delta} &= \langle \lambda, \beta | V(\underline{x} - \underline{y}) | \gamma, \delta \rangle \\ &= \int \mathrm{d}^3x \mathrm{d}^3y \psi^*_\lambda(x) \psi^*_\beta(y) V(\underline{x} - \underline{y}) \psi_\gamma(x) \psi_\delta(y) \end{aligned} \tag{1.3.44}$$

这里的模解 $\psi_\lambda(x)$ 是粒子间有两两相互作用的体系的场方程 (参见下面式 (1.3.47)) 的解.

证明　设体系的粒子数为 N, 该体系的任意态矢量为 $|\underline{x}_1,\underline{x}_2,\cdots,\underline{x}_N\rangle$. 由于有

$$
\begin{aligned}
&\hat{\psi}^+(\underline{x})\hat{\psi}^+(\underline{y})\hat{\psi}(\underline{y})\hat{\psi}(\underline{x})|\underline{x}_1,\underline{x}_2,\cdots,\underline{x}_N\rangle\\
=&\hat{\psi}^+(\underline{x})\hat{\psi}^+(\underline{y})\hat{\psi}(\underline{y})\hat{\psi}(\underline{x})\hat{\psi}^+(\underline{x}_1)\hat{\psi}^+(\underline{x}_2)\cdots\hat{\psi}^+(\underline{x}_N)|0\rangle\\
=&\sum_{i=1}^{N}(\pm1)^{i-1}\delta(\underline{x}-\underline{x}_i)\hat{\psi}^+(\underline{x})\hat{\psi}^+(\underline{y})\hat{\psi}(\underline{y})\hat{\psi}^+(\underline{x}_1)\cdots\hat{\psi}^+(\underline{x}_{i-1})\hat{\psi}^+(\underline{x}_{i+1})\cdots\hat{\psi}^+(\underline{x}_N)|0\rangle\\
=&\sum_{i=1}^{N}(\pm1)^{i-1}\delta(\underline{x}-\underline{x}_i)\hat{\psi}^+(\underline{x}_i)\sum_{j(\neq i)}^{N}\delta(\underline{y}-\underline{x}_j)\hat{\psi}^+(\underline{x}_1)\cdots\hat{\psi}^+(\underline{x}_{i-1})\hat{\psi}^+(\underline{x}_{i+1})\cdots\hat{\psi}^+(\underline{x}_N)|0\rangle\\
=&\sum_{i,j\neq i}^{N}\delta(\underline{x}-\underline{x}_i)\delta(\underline{y}-\underline{x}_j)|\underline{x}_1,\underline{x}_2,\cdots,\underline{x}_N\rangle
\end{aligned}
$$

其中, 我们利用了 $\delta(\underline{x}-\underline{x}_i)\hat{\psi}^+(\underline{x})=\delta(\underline{x}-\underline{x}_i)\hat{\psi}^+(\underline{x}_i)$ 以及粒子数密度算符 $\hat{\psi}^+(\underline{y})\hat{\psi}(\underline{y})\Rightarrow\sum_j\delta(\underline{y}-\underline{x}_j)$, 两端同乘以 $V(\underline{x}-\underline{y})/2$ 并对 $\underline{x}$ 和 $\underline{y}$ 进行积分, 则得到

$$
\hat{V}_{\text{int}}|\underline{x}_1,\underline{x}_2,\cdots,\underline{x}_N\rangle=\sum_{i\neq j}\frac{V(\underline{x}_i-\underline{x}_j)}{2}|\underline{x}_1,\underline{x}_2,\cdots,\underline{x}_N\rangle \tag{1.3.45}
$$

由 $|\underline{x}_1,\underline{x}_2,\cdots,\underline{x}_N\rangle$ 的任意性知, 式 (1.3.43) 所给出的 $\hat{V}_{\text{int}}$ 的确是对应于式 (1.3.42) 中 $\hat{V}_{\text{int}}$ 的二次量子化表象中的二体势.

显然对于任意二体算符也可得到类似结果.

既处于外场 V_1 又有两粒子相互作用势 V_2 的粒子体系的总哈密顿为

$$
\begin{aligned}
\hat{H}=&\int\mathrm{d}^3x\hat{\psi}^+(\underline{x},t)\left[-\frac{1}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2+V_1(\underline{x})\right]\hat{\psi}(\underline{x},t)\\
&+\frac{1}{2}\int\mathrm{d}^3x\mathrm{d}^3y\hat{\psi}^+(\underline{x},t)\hat{\psi}^+(\underline{y},t)V_2(\underline{x},\underline{y})\hat{\psi}(\underline{y},t)\hat{\psi}(\underline{x},t)
\end{aligned} \tag{1.3.46}
$$

将它代入海森伯方程 (1.2.8), 可导出这种情形下的**算符薛定谔场方程**:

$$
\left[\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}+\frac{1}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2-V_1(\underline{x})\right]\hat{\psi}(\underline{x},t)=\int\mathrm{d}^3y\hat{\psi}^+(\underline{y},t)\hat{\psi}(\underline{y},t)V_2(\underline{y},\underline{x})\hat{\psi}(\underline{x},t) \tag{1.3.47}
$$

二粒子势的一个重要例子是电子之间的库仑静电相互作用势:

$$
V(\underline{x},\underline{y})=\frac{e^2}{4\pi|\underline{x}-\underline{y}|} \tag{1.3.48}
$$

由前面的讨论可以看出, 量子场论能复制出量子力学理论. 除此之外, 它所引入的二次量子化还可以使我们拓广量子力学到新的领域:

(1) 在场论语言这种形式体系中自动地包括了态的正确的对称性或反称性 (参见式 (1.3.32));

(2) 可研究有宏观数目粒子的体系;

(3) 能描述大体系的动力学响应及内部关联;

(4) 能发展一种低能物理的激发或准粒子的描述;

(5) 能描述集合行为和破缺对称相变.

上述第 (1) 条是极其重要的, 因为对于全同粒子体系, 量子力学波函数必须满足一定对称性要求, 即玻色子体系波函数必须是对称的而费米子体系波函数必须是反称的. 这种要求对于计算大数目 ($\sim 10^{24}$) 粒子的体系的矩阵元是困难的. 场量子化方法却能避免这一困难.

五、不同表象中的场算符和力学量

前面我们已将场算符按 $\hat{H}^{\mathrm{QM}}$ 的本征态 $\{\psi_\lambda(\underline{x})\}$ (即能量本征态) 展开:

$$\hat{\psi}(\underline{x}) = \sum_\lambda \psi_\lambda(\underline{x})\hat{a}_\lambda = \sum_\gamma \langle \underline{x}|\psi_\lambda\rangle \hat{a}_\lambda \tag{1.3.49}$$

其中

$$\hat{H}^{\mathrm{QM}}\psi_\lambda(\underline{x}) = E_\lambda \psi_\lambda(\underline{x}) \tag{1.3.50}$$

但也可以采用其他表象, 特别是**动量表象** $\{\psi_{\underline{p}}(\underline{x}) \equiv \langle \underline{x}|\underline{p}\rangle\}$:

$$\hat{\psi}(\underline{x}) = \sum_{\underline{p}} \psi_{\underline{p}}(\underline{x})\hat{a}_{\underline{p}} = \sum_{\underline{p}} \langle \underline{x}|\underline{p}\rangle \hat{a}_{\underline{p}} \tag{1.3.51}$$

利用基底的封闭性关系 $\sum\limits_{\underline{p}} |\underline{p}\rangle\langle\underline{p}| = 1$, 不难得知有

$$\hat{a}_{\underline{p}} = \sum_\lambda \langle \underline{p}|\psi_\lambda\rangle \hat{a}_\lambda \tag{1.3.52}$$

进而也有

$$\hat{a}_{\underline{p}}^+ = \sum_\lambda \langle \psi_\lambda|\underline{p}\rangle \hat{a}_\lambda^+ \tag{1.3.53}$$

其中

$$\langle \underline{p}|\psi_\lambda\rangle = \int \mathrm{d}^3x \langle \underline{p}|\underline{x}\rangle\langle \underline{x}|\psi_\lambda\rangle = \int \mathrm{d}^3x \psi_{\underline{p}}^*(\underline{x})\psi_\lambda(\underline{x}) \tag{1.3.54}$$

称为动量表象和能量表象之间的转换振幅.

由 $\hat{a}_\lambda$, $\hat{a}_\lambda^+$ 所满足的正则关系式 (1.3.17) 和式 (1.3.18) 可知, 动量表象 (平面波表象) 中的产生和消灭算符同样满足正则关系, 即

$$[\hat{a}_{\underline{p}}, \hat{a}_{\underline{p}'}]_{\mp} = 0, \quad [\hat{a}^{+}_{\underline{p}}, \hat{a}^{+}_{\underline{p}'}]_{\mp} = 0 \tag{1.3.55}$$

$$[\hat{a}_{\underline{p}}, \hat{a}^{+}_{\underline{p}'}]_{\mp} = \delta_{\underline{pp}'} \tag{1.3.56}$$

像这种保持正则关系不变的变换称为**正则变换**. 上述方法可推广到其他表象及表象变换的情形.

在动量表象中, 粒子数密度算符可表达为

$$\hat{\rho}(\underline{q}) = \int \mathrm{d}^3 x \hat{n}(\underline{x}) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\underline{q}\cdot\underline{x}} = \sum_{\underline{p}} \hat{a}^{+}_{\underline{p}} \hat{a}_{\underline{p}+\underline{q}} \tag{1.3.57}$$

总粒子数则为

$$\hat{N} = \int \mathrm{d}^3 x \hat{n}(\underline{x}) = \sum_{\underline{p}} \hat{a}^{+}_{\underline{p}} \hat{a}_{\underline{p}} \tag{1.3.58}$$

令

$$V(\underline{x} - \underline{y}) = \int \frac{\mathrm{d}^3 q}{(2\pi)^3} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{q}\cdot(\underline{x}-\underline{y})} V(\underline{q}) \tag{1.3.59}$$

则两两相互作用势为

$$\hat{V}_{\mathrm{int}} = \frac{1}{2V} \sum_{\underline{pp}'\underline{q}} V(\underline{q}) \hat{a}^{+}_{\underline{p}} \hat{a}^{+}_{\underline{p}'} \hat{a}_{\underline{p}'+\underline{q}} \hat{a}_{\underline{p}-\underline{q}} \tag{1.3.60}$$

上式揭示了两粒子散射过程中的动量守恒, 如图 1.3.1 所示.

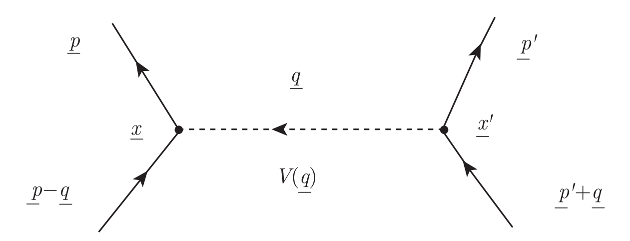


图 1.3.1　两粒子散射

粒子 1 以动量 $\underline{p} - \underline{q}$ 在 $\underline{x}$ 点入射, 粒子 2 以动量 $\underline{p}' + \underline{q}$ 在 $\underline{x}'$ 点入射, 并转移了动量 $\underline{q}$ 给粒子 1, 使得散射后的粒子的动量分别为 $\underline{p}$ 和 $\underline{p}'$.

既处于外场 V_1 又有两两相互作用势 V_2 的粒子体系的总哈密顿 (参见式 (1.3.46)) 为

$$\hat{H} = \sum_{\underline{p}} E_{\underline{p}} \hat{a}^{+}_{\underline{p}} \hat{a}_{\underline{p}} + \frac{1}{V} \sum_{\underline{p}\,\underline{q}} V_1(\underline{q}) \hat{a}^{+}_{\underline{p}+\underline{q}} \hat{a}_{\underline{p}} + \frac{1}{2V} \sum_{\underline{pp}'\underline{q}} V_2(\underline{q}) \hat{a}^{+}_{\underline{p}} \hat{a}^{+}_{\underline{p}'} \hat{a}_{\underline{p}'+\underline{q}} \hat{a}_{\underline{p}-\underline{q}} \tag{1.3.61}$$

注意对于外场 $V_1(\underline{x})$, 其二次量子化形式为

$$\int \mathrm{d}^3x\hat{\psi}^+(\underline{x})V_1(\underline{x})\hat{\psi}(\underline{x}) = \frac{1}{V}\sum_{\underline{p}\underline{p}'}\hat{a}^+_{\underline{p}}\hat{a}_{\underline{p}'}V_1(\underline{p}-\underline{p}')$$
$$= \frac{1}{V}\sum_{\underline{p}\,\underline{q}}V_1(\underline{q})\hat{a}^+_{\underline{p}+\underline{q}}\hat{a}_{\underline{p}} \tag{1.3.62}$$

其中, $V_1(\underline{q}) \equiv \int \mathrm{d}^3x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\underline{q}\cdot\underline{x}}V_1(\underline{x})$.

此外, 一旦考虑自旋, 还必须加上相应的自旋指标.

第四节 固体中的粒子和准粒子

在本节中, 我们用正则量子化途径来给出固体理论中常见的粒子和准粒子的场论描述. 固体中常见的准粒子有声子、极化子 (polaron)、激子 (exciton)、极化激元 (polariton) 和磁激元或自旋波量子 (magnon) 等. 对于电子、声子和光子, 我们给出了较为细致的描述; 但对于其他几种准粒子, 我们只给出较为简单的讨论. 这一方面是限于篇幅, 另一方面也是因为我们的目的不是讲述固体物理而是为了更简洁地表述场论的概念和方法.

一、周期势场中的电子

三维坐标空间中的理想晶体是由具有一定点群对称性的元胞的周期性点阵所构建的. 点阵中任意一个格点位置由**晶格矢量** (正格矢) $\underline{R}$ 决定: $\underline{R} = \sum_{i=1}^{3} n_i\underline{a}_i$ $(n_i = 0, \pm1, \pm2, \cdots)$, 其中, $\underline{a}_i$ 是点阵的基矢, 它构成了体积为 $\Omega = \underline{a}_1\cdot(\underline{a}_2\times\underline{a}_3)$ 的元胞. 在坐标空间中的周期性将生成动量空间中的倒点阵, 其格点位置由倒格矢 $\underline{K}$ 决定: $\underline{K} = \sum_{j=1}^{3} n_j\underline{b}_j (n_j = 0, \pm1, \pm2, \cdots)$, 其中, $\underline{b}_j$ 是倒点阵的基矢. 倒格矢是通过基本关系

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{K}\cdot\underline{R}} = 1 \tag{1.4.1}$$

与正格矢相联系的. 从而有 $\underline{a}_i\cdot\underline{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$. 倒点阵中最重要的一个元胞 BZ 称为**第一布里渊区**(或简约区), 它定义为满足如下关系的区域:

$$\underline{k} = \sum_{j=1}^{3}\eta_j\underline{b}_j \quad \left(-\frac{1}{2} < \eta_j \leqslant \frac{1}{2}\right) \tag{1.4.2}$$

即它是一个中心在 $\underline{K} = 0$ 处, 由从中心到所有最近邻 (有时也包括次近邻)$\underline{K}$ 矢量的连线的中垂面所围而成. 其中, $\underline{K}$ 为波矢.

在理想晶体中的自由传导电子 (或空穴 (hole)) 可用如下 (一次量子化) 哈密顿描述：

$$\hat{H}_0^{\mathrm{QM}} = \frac{\underline{\hat{p}}^2}{2m} + V_{\mathrm{L}}(\underline{x}) \tag{1.4.3}$$

其中, $V_{\mathrm{L}}(\underline{x}) = V_{\mathrm{L}}(\underline{x}+\underline{R})$ 是晶格周期势. 按照本章第三节所介绍的量子场论思想, 自由传导电子 (或空穴) 的薛定谔方程

$$\left[\frac{-\boldsymbol{\nabla}^2}{2m} + V_{\mathrm{L}}(\underline{x})\right]\hat{\psi}(\underline{x}) = \varepsilon\hat{\psi}(\underline{x})$$

应理解成场算符方程 (二次量子化), 其中, $\hat{\psi}(\underline{x})$ 是自由传导电子的场算符. 为了将 $\hat{\psi}(\underline{x})$ 直接用粒子的消灭算符来表达, 我们只需求出 $\hat{H}_0^{\mathrm{QM}}$ 的本征函数.

这样的体系有两个重要的对称性质.

(1) 平移对称性.

$\hat{H}_0^{\mathrm{QM}}$ 在平移群 $\{T_R\}$ 下不变：

$$T_{\underline{R}}\hat{H}_0^{\mathrm{QM}}(\underline{x}) = \hat{H}_0^{\mathrm{QM}}(\underline{x}+\underline{R}) = \hat{H}_0^{\mathrm{QM}}(\underline{x})$$

这意味着平移算符与哈密顿对易. 由于平移群是阿贝尔群, 故薛定谔方程

$$\hat{H}_0^{\mathrm{QM}}\psi_{n\underline{k}}(\underline{x}) = \varepsilon_{n\underline{k}}\psi_{n\underline{k}}(\underline{x}) \tag{1.4.4}$$

的本征函数 $\psi_{n\underline{k}}(\underline{x})$ 形成了平移群的一维幺正表示 (它可用波矢 $\underline{k} \in \mathrm{BZ}$ 来参数化), 从而平移 $\underline{R}$ 的作用为

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{k}\cdot\underline{R}}\psi_{n\underline{k}}(\underline{x}) = \psi_{n\underline{k}}(\underline{x}+\underline{R}) \tag{1.4.5}$$

其中, 下标 n 是能带指标. 由此知 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\underline{k}\cdot\underline{x}}\psi_{n\underline{k}}(\underline{x})$ 是周期函数, 使得有所谓的**布洛赫 (Bloch) 定理**：

$$\psi_{n\underline{k}}(\underline{x}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{k}\cdot\underline{x}}u_{n\underline{k}}(\underline{x}), \quad u_{n\underline{k}}(\underline{x}+\underline{R}) = u_{n\underline{k}}(\underline{x}) \tag{1.4.6}$$

其中, $\psi_{n\underline{k}}(\underline{x})$ 和 $u_{n\underline{k}}(\underline{x})$ 分别被称为布洛赫函数和晶胞周期函数. 如果需要考虑电子自旋, 还应计入自旋指标, 此时有

$$\psi_{n\underline{k}\sigma}(\underline{x}) \equiv \psi_{n\underline{k}}(\underline{x})|\sigma\rangle \tag{1.4.7}$$

其中, $\sigma = +, -$. 并且

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{1.4.8}$$

将式 (1.4.6) 插入式 (1.4.4) 得到晶胞周期函数所满足的方程

$$\left[\frac{(-\mathrm{i}\boldsymbol{\nabla}+\underline{k})^2}{2m} + V_{\mathrm{L}}(\underline{x})\right]u_{n\underline{k}}(\underline{x}) = \varepsilon_{n\underline{k}}u_{n\underline{k}}(\underline{x}) \tag{1.4.9}$$

能量本征值 $\{\varepsilon_{n\underline{k}}\}$ 构成能带, 而不同 n 对应不同能带.

(2) 时间反演对称性.

根据量子力学, 时间反演操作相当于: $\underline{x} \to \underline{x}$, $\underline{k} \to -\underline{k}$. (若考虑自旋, 自旋应反向: $\underline{S} \to -\underline{S}$) 这样布洛赫函数 $\psi_{n\underline{k}}(\underline{x})$ (或 $\psi_{n\underline{k}\sigma}(\underline{x})$) 的时间反演态为 $\psi_{n,-\underline{k}}(\underline{x})$ (或 $\psi_{n,-\underline{k},-\sigma}(\underline{x})$), 而时间反演对称性要求它们满足同样的能量本征方程且有相同能量本征值 (Kramers 定理): $\varepsilon_{n\underline{k}} = \varepsilon_{n,-\underline{k}}$ (或 $\varepsilon_{n,\underline{k},\sigma} = \varepsilon_{n,-\underline{k},-\sigma}$).

在计算中将波矢值取成分离值是方便的, 故可施加周期性边界条件给晶体, 从而有

$$\underline{k} = \sum_{j=1}^{3} \frac{h_j}{2L_j} \underline{b}_j \quad (-L_j + 1 \leqslant h_j \leqslant L_j) \tag{1.4.10}$$

其中, 晶体体积为 $V = L\Omega = 8L_1L_2L_3\Omega$. 由此可见格胞数 L 也等于 BZ 中的 k 点的数目 N. 易证有如下常用关系式:

$$\frac{1}{N} \sum_{\underline{R}\in V} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{k}\cdot\underline{R}} = \sum_{\underline{K}} \delta_{\underline{k}\underline{K}} \tag{1.4.11}$$

其中, $\underline{k}$ 是不限制于 BZ 中的任意波矢. 对于任意正格矢 $\underline{R}$, 有

$$\frac{1}{N} \sum_{\underline{k}\in \mathrm{BZ}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{k}\cdot\underline{R}} = \delta_{\underline{R}0} \tag{1.4.12}$$

适当选择归一化因子可使布洛赫函数满足如下正交归一关系:

$$\int_V \mathrm{d}^3x \psi^*_{n\underline{k}}(\underline{x})\psi_{n'\underline{k}'}(\underline{x}) = \delta_{nn'}\delta_{\underline{k}\underline{k}'} \tag{1.4.13}$$

它也满足封闭性关系:

$$\sum_{n,\underline{k}} \psi^*_{n\underline{k}}(\underline{x})\psi_{n\underline{k}}(\underline{x}') = \delta^3(\underline{x} - \underline{x}') \tag{1.4.14}$$

由式 (1.4.11) 易知, 晶胞周期函数满足元胞 C 中的如下正交归一关系:

$$\int_C \mathrm{d}^3x u^*_{n\underline{k}}(\underline{x})u_{n'\underline{k}}(\underline{x}) = \delta_{nn'}/N \tag{1.4.15}$$

在自由空间中, 描述局域性的波包可用扩展到全平面的平面波的叠加来构建. 与此类似, 在晶体中, 可用扩展到整个晶体的布洛赫函数的叠加来构建描述局域态的**万尼尔**(Wannier) 函数:

$$w_n(\underline{x} - \underline{R}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\underline{k}\in \mathrm{BZ}} \psi_{n\underline{k}}(\underline{x} - \underline{R}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\underline{k}\in \mathrm{BZ}} \psi_{n\underline{k}}(\underline{x})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\underline{k}\cdot\underline{R}} \tag{1.4.16}$$

这个函数局域在 $\underline{x}=\underline{R}$ 周围. 利用式 (1.4.11) 及式 (1.4.5), 可得

$$\psi_{n\underline{k}}(\underline{x})=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\underline{R}\in V}w_n(\underline{x}-\underline{R})\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\underline{k}\cdot\underline{R}}=\psi_{n,\underline{k}+\underline{K}}(\underline{x}) \tag{1.4.17}$$

由此知能带也有这种倒点阵中的周期性：$\varepsilon_{n\underline{k}}=\varepsilon_{n,\underline{k}+\underline{K}}$. 不难证明万尼尔函数也满足正交归一关系和封闭性关系：

$$\int \mathrm{d}^3x w_n^*(\underline{x}-\underline{R})w_{n'}(\underline{x}-\underline{R}')=\delta_{nn'}\delta_{\underline{R}\,\underline{R}'} \tag{1.4.18}$$

$$\sum_{n\underline{R}}w_n^*(\underline{x}-\underline{R})w_n(\underline{x}'-\underline{R})=\delta^3(\underline{x}-\underline{x}') \tag{1.4.19}$$

由于布洛赫函数和万尼尔函数都构成了完全集, 故它们都可作为态空间基底, 这样我们既可采用布洛赫表象也可采用万尼尔表象.

在布洛赫表象中, 场算符可表示为

$$\hat{\psi}(\underline{x})=\sum_{n\underline{k}}\psi_{n\underline{k}}(\underline{x})\hat{c}_{n\underline{k}} \tag{1.4.20}$$

在万尼尔表象中为

$$\hat{\psi}(\underline{x})=\sum_{n\underline{R}}w_n(\underline{x}-\underline{R})\hat{c}_{n\underline{R}} \tag{1.4.21}$$

其中, $\hat{c}_{n\underline{R}}$ 代表在 n 能带 $\underline{R}$ 格点局域态上电子的消灭算符. 由此知这两种表象中的消灭和产生算符的变换关系为

$$\hat{c}_{n\underline{k}}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\underline{R}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\underline{k}\cdot\underline{R}}\hat{c}_{n\underline{R}},\quad \hat{c}_{n\underline{R}}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\underline{k}\in\mathrm{BZ}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{k}\cdot\underline{R}}\hat{c}_{n\underline{k}} \tag{1.4.22}$$

下面我们只对费米能级位于其中的特殊能带的贡献感兴趣, 故考虑所谓的**单带模型**而略去能带指标并补加上自旋指标. 我们还将正格矢用一个可数性角标 $i=1,2,\cdots,N$ 来标记成 $\underline{R}=\underline{R}_i$. 这样在布洛赫表象与万尼尔表象之间的变换表达为

$$\hat{c}_{\underline{k}\sigma}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{i}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\underline{k}\cdot\underline{R}_i}\hat{c}_{i\sigma},\quad \hat{c}_{i\sigma}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\underline{k}\in\mathrm{BZ}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{k}\cdot\underline{R}_i}\hat{c}_{\underline{k}\sigma} \tag{1.4.23}$$

自由传导电子体系的哈密顿为

$$\begin{aligned}\hat{H}_0&=\int \mathrm{d}^3x\hat{\psi}^+(\underline{x})\hat{H}_0^{\mathrm{QM}}\hat{\psi}(\underline{x})=\sum_{\underline{k}\sigma}\varepsilon_{\underline{k}}\hat{c}_{\underline{k}\sigma}^+\hat{c}_{\underline{k}\sigma}\\&=\frac{1}{N}\sum_{ij}\sum_{\underline{k}\sigma}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{k}\cdot(\underline{R}_i-\underline{R}_j)}\varepsilon_{\underline{k}}\hat{c}_{i\sigma}^+\hat{c}_{j\sigma}\end{aligned}$$

即

$$\hat{H}_0 = \sum_{ij\sigma} t_{ij} \hat{c}^+_{i\sigma} \hat{c}_{j\sigma} \tag{1.4.24}$$

其中

$$t_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{\underline{k}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{k}\cdot(\underline{R}_i - \underline{R}_j)} \varepsilon_{\underline{k}} \tag{1.4.25}$$

它描述了电子从格位 j 到格位 i 的迁徙. t_{ij} 的大小是由近邻原子的有效交叠来确定的. 有两种特殊情形:

(1) **原子极限**. 其中 $t_{ij} \propto \delta_{ij}$, 它的简并能级 $\varepsilon_{\underline{k}} = \text{const}$. 在这种极端情形, 原子之间的输运不存在.

(2) **紧束缚近似**. 虽然 $t_{i,j\neq i}$ 不为零, 但轨道交叠很弱使得仅最近邻的迁徙才有贡献.

二、电子–声子相互作用、极化子

(一) 自由声子

设理想晶体每个元胞中含有 r 个原子 (或离子), 原子的平衡位置在 $\underline{R} + \underline{r}_\nu$ 处, $(\nu = 1, 2, \cdots, r)$. 在 $\underline{R}$ 处的元胞中, 每个原子离开平衡位置的位移矢量为 $\underline{u}_\nu(\underline{R}, t)$. 设晶体的总势能为 V, 在简谐近似下它可表达成

$$V = V_0 + \frac{1}{2} \sum_{\underline{R}\nu\underline{R}'\nu'} \underline{u}_\nu(\underline{R}, t) \boldsymbol{C}_{\nu\nu'}(\underline{R} - \underline{R}') \underline{u}_{\nu'}(\underline{R}', t) \tag{1.4.26}$$

式中, V_0 是所有原子处于平衡位置时的势能; 力常数矩阵(分量为 $C_{\nu\nu',ij}$)

$$\boldsymbol{C}_{\nu\nu'}(\underline{R} - \underline{R}') = \left. \frac{\partial^2 V}{\partial \underline{u}_\nu(\underline{R}, t) \partial \underline{u}_{\nu'}(\underline{R}', t)} \right|_0$$

其中, 下标 0 表示求导是在平衡位形处计算的. 注意到可以任意移动坐标原点而不会改变 $\boldsymbol{C}_{\nu\nu'}$, 故它只依赖于差值 $\underline{R} - \underline{R}'$. 又由于 V 对 $\underline{u}_\nu(\underline{R}, t)$ 的一阶导数在平衡位置处应为零, 故式 (1.4.26) 中不含 $\underline{u}_\nu(\underline{R}, t)$ 的一阶项. 这样在略去无关紧要的常数项后, 晶格振动体系的拉格朗日函数为

$$L^{\text{ph}} = \sum_{\underline{R}\nu} \left\{ \frac{M_\nu}{2} \dot{\underline{u}}^2_\nu(\underline{R}, t) - \frac{1}{2} \sum_{\underline{R}'\nu'} \underline{u}_\nu(\underline{R}, t) \boldsymbol{C}_{\nu\nu'}(\underline{R} - \underline{R}') \underline{u}_{\nu'}(\underline{R}', t) \right\} \tag{1.4.27}$$

其中, M_ν 是第 ν 个原子的质量. 由此可求出它的运动方程:

$$M_\nu \ddot{\underline{u}}_\nu(\underline{R}, t) = -\sum_{\underline{R}'\nu'} \boldsymbol{C}_{\nu\nu'}(\underline{R} - \underline{R}') u_{\nu'}(\underline{R}', t) \tag{1.4.28}$$

和前面几节讨论的连续场不同, $\underline{u}_\nu(\underline{R},t)$ 是有 $3r$ 个内部自由度的定义于离散格点上的**场**, 式 (1.4.28) 正是它的场方程. 当 $\underline{u}_\nu(\underline{R},t)$ 被量子化后, 这个量子场的量子就是**声子**. 上两式对应的是自由声子体系.

场方程显然有如下形式的周期性的模解:

$$\frac{1}{\sqrt{2NrM_\nu\omega_{\tilde{q}}}}\mathrm{e}^{\mp\mathrm{i}(\omega_{\tilde{q}}t-\underline{q}\cdot\underline{R})}\underline{e}_{\pm\tilde{q}}(\nu) \tag{1.4.29}$$

其中, 指数前因子是归一化因子; **混合指标** $\pm\tilde{q}\equiv(\mu,\pm\underline{q},\lambda)$; $\underline{q}\in\mathrm{BZ}$; $\mu=1,2,\cdots,r$ 是分支指标; $\lambda=1,2,3$ 是极化指标; $\omega_{\tilde{q}}$ 是振动频率; $\underline{e}_{\tilde{q}}(\nu)$ 是复极化矢量. 将式 (1.4.29) 代入运动方程得

$$\omega_{\tilde{q}}^2\underline{e}_{\pm\tilde{q}}(\nu)=\sum_{\underline{R}'\nu'}\frac{1}{\sqrt{M_\nu M_{\nu'}}}\mathrm{e}^{\mp\mathrm{i}\underline{q}\cdot(\underline{R}-\underline{R}')}\boldsymbol{C}_{\nu\nu'}(\underline{R}-\underline{R}')\underline{e}_{\pm\tilde{q}}(\nu') \tag{1.4.30}$$

注意到求和内的表达式仅依赖于 $\underline{R}-\underline{R}'$, 故对 $\underline{R}'$ 的求和可改为对 $\underline{R}-\underline{R}'$ 的求和. 定义 “动力学矩阵”$\boldsymbol{D}_{\nu\nu'}(\underline{q})$ 为

$$\boldsymbol{D}_{\nu\nu'}(\underline{q})=\sum_{\underline{R}}\frac{1}{\sqrt{M_\nu M_{\nu'}}}\boldsymbol{C}_{\nu\nu'}(\underline{R})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\underline{q}\cdot\underline{R}} \tag{1.4.31}$$

则只要 $\omega_{-\tilde{q}}=\omega_{\tilde{q}}$, 式 (1.4.30) 就可写成如下的本征方程:

$$\sum_{\nu'}\boldsymbol{D}_{\nu\nu'}(\underline{q})\underline{e}_{\tilde{q}}(\nu')=\omega_{\tilde{q}}^2\underline{e}_{\tilde{q}}(\nu) \tag{1.4.32}$$

本征方程的分量形式为

$$\sum_{\nu'i'}D_{\nu\nu',ii'}(\underline{q})e_{\tilde{q}i'}(\nu')=\omega_{\tilde{q}}^2e_{\tilde{q}i}(\nu)\quad(i=1,2,3) \tag{1.4.33}$$

本征方程只能确定这些矢量到相差一个常数因子, 故可进一步引入归一化条件:

$$\frac{1}{r}\sum_{\nu}e^*_{(\mu\underline{q}\lambda)i}(\nu)e_{(\mu'\underline{q}\lambda')i}(\nu)=\delta_{\mu\mu'}\delta_{\lambda\lambda'} \tag{1.4.34}$$

这样, (在海森伯绘景下) 位移矢量算符可表达为

$$\hat{\underline{u}}_\nu(\underline{R},t)=\sum_{\tilde{q}}\frac{1}{\sqrt{2NrM_\nu\omega_{\tilde{q}}}}\left[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\omega_{\tilde{q}}t-\underline{q}\cdot\underline{R})}\underline{e}_{\tilde{q}}(\nu)\hat{b}_{\tilde{q}}+\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega_{\tilde{q}}t-\underline{q}\cdot\underline{R})}\underline{e}_{-\tilde{q}}\hat{b}^+_{\tilde{q}}\right] \tag{1.4.35}$$

其中, 括号内第二项中的算符必须是 $\hat{b}^+_{\tilde{q}}$, 这来自于 $\hat{\underline{u}}_\nu(\underline{R},t)$ 的厄米性要求 (因晶格位移总是实位移), 并且由 $\hat{\underline{u}}_\nu(\underline{R},t)$ 的厄米性还知

$$e_{-\tilde{q},i}(\nu)=e^*_{\tilde{q}i}(\nu) \tag{1.4.36}$$

借助于对场算符施加的等时量子化关系, 用与本章第三节类似的方法可证明 $\hat{b}_{\tilde{q}}$ 和 $\hat{b}^+_{\tilde{q}}$ 分别是声子的消灭和产生算符, 由于声子自旋为零, 它们满足通常的对易子代数关系. 与式 (1.3.12) 相比较, 式 (1.4.35) 中右端多了一项, 这是薛定谔方程只有时间的一阶导数, 而式 (1.4.28) 有时间的二阶导数的缘故.

场量 $\hat{\underline{u}}_\nu(\underline{R},t)$ 的共轭动量为 $\hat{\underline{p}}_\nu(\underline{R},t)=\dfrac{\partial L^{\rm ph}}{\partial\partial_t\underline{u}_\nu(\underline{R},t)}=M_\nu\partial_t\underline{u}_\nu(\underline{R},t)$, 故

$$\hat{\underline{p}}_\nu(\underline{R},t)=(-{\rm i})\sum_{\tilde{q}}\sqrt{\frac{M_\nu\omega_{\tilde{q}}}{\sqrt{2Nr}}}\left[{\rm e}^{-{\rm i}(\omega_{\tilde{q}}t-\underline{q}\cdot\underline{R})}\underline{e}_{\tilde{q}}(\nu)\hat{b}_{\tilde{q}}-{\rm e}^{{\rm i}(\omega_{\tilde{q}}t-\underline{q}\cdot\underline{R})}\underline{e}_{-\tilde{q}}\hat{b}^+_{\tilde{q}}\right] \tag{1.4.37}$$

体系的哈密顿为

$$\hat{H}^{\rm ph}=\sum_{\underline{R}\nu}\left\{\frac{\hat{\underline{p}}^2_\nu(\underline{R},t)}{2M_\nu}+\frac{1}{2}\sum_{\underline{R}'\nu'}\hat{\underline{u}}_\nu(\underline{R},t)\boldsymbol{C}_{\nu\nu'}(\underline{R}-\underline{R}')\hat{\underline{u}}_{\nu'}(\underline{R}',t)\right\} \tag{1.4.38}$$

利用式 (1.4.34)、式 (1.4.35) 以及式 (1.4.37), 得

$$\begin{aligned}\sum_{\underline{R}\nu}\frac{\hat{\underline{p}}^2_\nu(\underline{R},t)}{2M_\nu}&=\sum_{\underline{R}\nu}\frac{\hat{\underline{p}}^+_\nu(\underline{R},t)\hat{\underline{p}}_\nu(\underline{R},t)}{2M_\nu}\\&=\frac{1}{4}\sum_{\tilde{q}}\omega_{\tilde{q}}\left(\hat{b}^+_{\tilde{q}}\hat{b}_{\tilde{q}}+\hat{b}_{\tilde{q}}\hat{b}^+_{\tilde{q}}-{\rm e}^{2{\rm i}\omega_{\tilde{q}}t}\hat{b}^+_{\tilde{q}}\hat{b}^+_{-\tilde{q}}-{\rm e}^{-2{\rm i}\omega_{\tilde{q}}t}\hat{b}_{\tilde{q}}\hat{b}_{-\tilde{q}}\right)\end{aligned}$$

当计算 $\dfrac{1}{2}\displaystyle\sum_{\underline{R}\nu}\sum_{\underline{R}'\nu'}\hat{u}_\nu(\underline{R},t)\boldsymbol{C}_{\nu\nu'}(\underline{R}-\underline{R}')\hat{u}_{\nu'}(\underline{R}',t)$ 时, 注意可将对 $\underline{R},\underline{R}'$ 的求和改为对质心坐标 $\underline{R}_g=\dfrac{\underline{R}+\underline{R}'}{2}$ 和相对坐标 $\underline{R}_r=\underline{R}-\underline{R}'$ 进行求和: $\displaystyle\sum_{\underline{R}\,\underline{R}'}\to\sum_{\underline{R}_g R_r}$, 并利用式 (1.4.30), 则

$$\begin{aligned}&\frac{1}{2}\sum_{\underline{R}\nu}\sum_{\underline{R}'\nu'}\hat{u}_\nu(\underline{R})\boldsymbol{C}_{\nu\nu'}(\underline{R}-\underline{R}')\hat{u}_{\nu'}(\underline{R}')\\=&\frac{1}{4}\sum_{\tilde{q}}\omega_{\tilde{q}}\left(\hat{b}^+_{\tilde{q}}\hat{b}_{\tilde{q}}+\hat{b}_{\tilde{q}}\hat{b}^+_{\tilde{q}}+{\rm e}^{2{\rm i}\omega_{\tilde{q}}t}\hat{b}^+_{\tilde{q}}\hat{b}^+_{-\tilde{q}}+{\rm e}^{-2{\rm i}\omega_{\tilde{q}}t}\hat{b}_{\tilde{q}}\hat{b}_{-\tilde{q}}\right)\end{aligned}$$

故自由声子的哈密顿为

$$\hat{H}^{\rm ph}=\sum_{\tilde{q}}\omega_{\tilde{q}}\left(\hat{b}^+_{\tilde{q}}\hat{b}_{\tilde{q}}+\frac{1}{2}\right) \tag{1.4.39}$$

其中, $\hat{N}_{\tilde{q}}=\hat{b}^+_{\tilde{q}}\hat{b}_{\tilde{q}}$ 是模式 $\tilde{q}$ 中的声子数; $\omega_{\tilde{q}}/2$ 代表模式 $\tilde{q}$ 的零点能.

(二) 电子–声子相互作用、极化子

一个与声子相互作用的电子被称为 “**极化子**”. 这种相互作用影响着各种金属的输运性质, 电子受声子散射是金属电阻的重要原因. 在纯粹半导体和离子固体中, 电声相互作用通常支配了输运性质. 在 BCS(Bardeen-Cooper-Schrieffer) 超导理论中, 电子运动使离子极化, 极化了的场又作用于另外一个电子, 这种电子之间交换虚声子的过程是引起超导性的原因.

为了更简便地导出电子–声子相互作用哈密顿, 可采用薛定谔绘景 (参见第二章第二节). 哈密顿在这个绘景中与在海森伯绘景中有相同形式, 并且算符 $\underline{\hat{u}}_\nu(\underline{R})$ 可表达为

$$\underline{\hat{u}}_\nu(\underline{R}) = \sum_{\tilde{q}} \frac{1}{\sqrt{2NrM_\nu\omega_{\tilde{q}}}} \left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{q}\cdot\underline{R}} \underline{e}_{\tilde{q}}(\nu)\hat{b}_{\tilde{q}} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\underline{q}\cdot\underline{R}} \underline{e}_{-\tilde{q}} \hat{b}_{\tilde{q}}^{+} \right] \tag{1.4.40}$$

设电子的位置矢量为 $\underline{r}_j$, 离子的位置矢量为 $\underline{R} + \underline{r}_\nu + \underline{u}_\nu(\underline{R})$, 则电子和离子之间的相互作用由哈密顿 $\hat{H}_{\mathrm{ei}}$ (一次量子化形式) 描述:

$$\hat{H}_{\mathrm{ei}} = \sum_{\underline{R}\nu j} V_{\mathrm{ei}}[\underline{R} + \underline{r}_\nu + \underline{u}_\nu(\underline{R}) - \underline{r}_j] \tag{1.4.41}$$

其中, V_{ei} 是屏蔽库仑势. 注意这里的 “离子” 一词, 对于金属应理解成通常的离子含义, 而对于共价键半导体又可以理解成别的东西等. 按 $\underline{u}_\nu(\underline{R})$ 幂次展开得

$$\hat{H}_{\mathrm{ei}} = \sum_{\underline{R}\nu j} \left[V_{\mathrm{ei}}(\underline{R} + \underline{r}_\nu - \underline{r}_j) + \underline{u}_\nu(\underline{R}) \cdot \boldsymbol{\nabla} V_{\mathrm{ei}}(\underline{R} + \underline{r}_\nu - \underline{r}_j) + 0(u^2) \right] \tag{1.4.42}$$

其中, 右边第一项是当原子处于平衡位置时电子的势能, 它形成晶体中的周期势; 第二项就是通常的电子–声子相互作用:

$$\hat{H}_{\mathrm{ep}} = \sum_{\underline{R}\nu j} \underline{u}_\nu(\underline{R}) \cdot \boldsymbol{\nabla} V_{\mathrm{ei}}(\underline{R} + \underline{r}_\nu - \underline{r}_j) \tag{1.4.43}$$

设屏蔽库仑势的傅里叶变换为

$$V_{\mathrm{ei}}(\underline{R} + \underline{r}_\nu - \underline{r}_j) = \frac{1}{V} \sum_{\underline{q}} V_{\mathrm{ei}}(\underline{q}) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{q}\cdot(\underline{R} + \underline{r}_\nu - \underline{r}_j)} \tag{1.4.44}$$

故

$$\boldsymbol{\nabla} V_{\mathrm{ei}}(\underline{R} + \underline{r}_\nu - \underline{r}_j) = \frac{\mathrm{i}}{V} \sum_{\underline{q}} \underline{q} V_{\mathrm{ei}}(\underline{q}) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{q}\cdot(\underline{R} + \underline{r}_\nu - \underline{r}_j)} \tag{1.4.45}$$

将式 (1.4.44) 和式 (1.4.45) 以及式 (1.4.40) 代入式 (1.4.43) 就得到

$$\hat{H}_{\mathrm{ep}} = \frac{\mathrm{i}}{\Omega} \sum_{\underline{K}\nu j\tilde{q}\underline{q}'} \frac{1}{\sqrt{2NrM_\nu\omega_{\tilde{q}}}} V_{\mathrm{ei}}(\underline{q}') \mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{q}'\cdot(\underline{r}_\nu - \underline{r}_j)} \underline{q}' \cdot \underline{e}_{\tilde{q}}(\nu) \delta_{\underline{q}+\underline{q}',\underline{K}} \left(\hat{b}_{\tilde{q}} + \hat{b}_{-\tilde{q}}^{+} \right) \tag{1.4.46}$$

由式 (1.3.36a) 知粒子数密度算符的傅里叶变换为

$$\begin{aligned}\hat{\rho}^{\mathrm{QM}}(\underline{q}) &= \int \mathrm{d}^3 x \hat{n}^{\mathrm{QM}}(\underline{x})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\underline{q}\cdot\underline{x}} \\ &= \int \mathrm{d}^3 x \sum_j \delta(\underline{x}-\underline{r}_j)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\underline{q}\cdot\underline{x}} = \sum_j \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\underline{q}\cdot\underline{r}_j}\end{aligned} \tag{1.4.47}$$

故由式 (1.3.57) 知, $\sum\limits_j \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\underline{q}\cdot\underline{r}_j}$ 的二次量子化形式为

$$\sum_j \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\underline{q}\cdot\underline{r}_j} \Rightarrow \hat{\rho}(\underline{q}) = \sum_{\underline{p}\sigma} \hat{c}^+_{\underline{p}\sigma}\hat{c}_{\underline{p}+\underline{q},\sigma} \tag{1.4.48}$$

这样, 电子–声子相互作用哈密顿可写成

$$\hat{H}_{\mathrm{ep}} = \sum_{\underline{K}\underline{q}'\tilde{q}} \sum_{\underline{p}\sigma} \delta_{\underline{q}+\underline{q}',\underline{K}} \gamma_{\tilde{q}}(\underline{q}')\hat{c}^+_{\underline{p}\sigma}\hat{c}_{\underline{p}+\underline{q}',\sigma}\left(\hat{b}_{\tilde{q}} + \hat{b}^+_{-\tilde{q}}\right) \tag{1.4.49}$$

其中, $\gamma_{\tilde{q}}$ 为耦合函数：

$$\gamma_{\tilde{q}}(\underline{q}') = \frac{\mathrm{i}}{\Omega}\sum_{\nu} \frac{1}{\sqrt{2NrM_\nu\omega_{\tilde{q}}}} V_{\mathrm{ei}}(\underline{q}')\mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{q}'\cdot\underline{r}_\nu}\underline{q}'\cdot\underline{e}_{\tilde{q}}(\nu) \tag{1.4.50}$$

它满足关系 $\gamma_{\tilde{q}}(\underline{q}') = \gamma^*_{-\tilde{q}}(-\underline{q}')$. 在式 (1.4.49) 中, $\underline{q} \in \mathrm{BZ}$. 可是 $\underline{q}'$ 不受限制. 当倒格矢 $\underline{K} \neq 0$ 时, $\delta_{\underline{q}+\underline{q}',\underline{K}}$ 表明有动量转移到晶格, 这称为**倒逆过程**(umklapp process).

在式 (1.4.42) 中, 我们仅考虑了 u_ν 的一次项, 但 u_ν 的高次项也可在电子–声子相互作用中起作用. 例如, 可以用多声子过程来解释半导体的载流子迁徙率的某些温度反常.

在晶格振动体系的拉格朗日中, 我们也仅考虑了 u_ν 的二次项 (简谐项), 而 3 次以上的非简谐项将涉及声子–声子相互作用. 它在介电晶体的热膨胀、热传导或次声等热学性质上起作用. 非简谐性对轻原子尤为重要, 因为此时原子的位移可与格点间距相比较.

三、紧束缚近似中的相互作用

在许多固体中, 电子局域在原子格位处, 只有较小概率迁徙到最近邻格位上, 这种行为可在紧束缚近似下来描述. 在这种近似下, 虽然理论表述形式相对简洁, 但仍有丰富的物理内涵. 对于紧束缚体系, 传导电子之间的相互作用不仅能影响体系基态性质, 也能影响准粒子激发的性质. 可公度效应和相互作用一起能使体系趋向关联磁态或者绝缘相. 正因为这样, 我们很多时候将以紧束缚体系作为场论模型来加以讨论. 对这种体系, 适当的表象是万尼尔表象. 为简单起见, 仍考虑单能带情形,

这样当考虑电子自旋以及电子之间的库仑相互作用时, 有

$$\hat{H}_{\text{ee}}=\frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3x\mathrm{d}^3y\hat{\psi}_{\sigma}^{+}(\underline{x})\hat{\psi}_{\sigma'}^{+}(\underline{y})V(\underline{x}-\underline{y})\hat{\psi}_{\sigma'}(\underline{y})\hat{\psi}_{\sigma}(\underline{x}) \tag{1.4.51}$$

其中, **重复的自旋指标自动求和, 以下也采用这一约定**.

将

$$\hat{\psi}_{\sigma}(\underline{x})=\sum_i w(\underline{x}-\underline{R}_i)\hat{c}_{i\sigma} \tag{1.4.52}$$

代入式 (1.4.51) 得

$$\hat{H}_{\text{ee}}=\frac{1}{2}\sum_{ijkl}V_{ijkl}\hat{c}_{i\sigma}^{+}\hat{c}_{j\sigma'}^{+}\hat{c}_{l\sigma'}\hat{c}_{k\sigma} \tag{1.4.53}$$

其中

$$V_{ijkl}=\int \mathrm{d}^3x\mathrm{d}^3yw*(\underline{x}-\underline{R}_i)w*(\underline{y}-\underline{R}_j)V(\underline{x}-\underline{y})w(\underline{x}-\underline{R}_k)w(\underline{y}-\underline{R}_l) \tag{1.4.54}$$

而完全哈密顿就可写成

$$\hat{H}=\sum_{ij}t_{ij}\hat{c}_{i\sigma}^{+}\hat{c}_{j\sigma}+\frac{1}{2}\sum_{ijkl}V_{ijkl}\hat{c}_{i\sigma}^{+}\hat{c}_{j\sigma'}^{+}\hat{c}_{l\sigma'}\hat{c}_{k\sigma} \tag{1.4.55}$$

对于紧束缚近似, 取

$$t_{ij}=\begin{cases}\varepsilon & (j=i)\\ -t & (\langle ij\rangle)\\ 0 & (\text{其他情形})\end{cases} \tag{1.4.56}$$

其中, 符号 $\langle ij\rangle$ 代表格位 i,j 是最近邻的. V_{ijkl} 的角标或者是相同的, 或者是代表最近邻格位的. 若 $i\neq j\neq k\neq l$, 则式 (1.4.54) 所代表的是 4 心积分, 它通常很小而加以忽略. 故我们仅考察其中一些角标相同的情形.

(1) $V_{ijkl}=U\delta_{ij}\delta_{kl}\delta_{ik}$.

这样, 相互作用项简化为

$$\frac{U}{2}\sum_i\hat{c}_{i\sigma}^{+}\hat{c}_{i\sigma'}^{+}\hat{c}_{i\sigma'}\hat{c}_{i\sigma}=U\sum_i\hat{n}_{i\uparrow}\hat{n}_{i\downarrow}$$

其中, 利用了 $\hat{c}_{i\sigma}^2=0(\sigma=\uparrow,\downarrow)$. 由此得到**单带 Hubbard 模型**:

$$\hat{H}=-t\sum_{\langle ij\rangle}\left(\hat{c}_{i\sigma}^{+}\hat{c}_{j\sigma}+\text{h.c.}\right)+\varepsilon\sum_i\hat{c}_{i\sigma}^{+}\hat{c}_{i\sigma}+U\sum_i\hat{n}_{i\uparrow}\hat{n}_{i\downarrow} \tag{1.4.57}$$

该模型被认为是窄带材料 (如过渡金属氧化物等) 中电子传导的一个较好的模型. 它在磁性理论, 金属绝缘相变, 以及在描述高温超导体中的电子运动中起到重要作用.

(2) V_{ijkl} 中的**直接耦合项** $V_{ijij} \equiv V_{ij}(i \neq j)$.

该项对应的哈密顿为

$$\frac{1}{2}\sum_{i\neq j} V_{ij}\hat{n}_i\hat{n}_j \tag{1.4.58}$$

其中, $\hat{n}_i = \hat{c}^+_{i\sigma}\hat{c}_{i\sigma}$. 它描述了局域在邻近格位上的电荷之间的相互作用. 在某些材料中, 它能引起电荷分布的整体不稳定性 (称为电荷密度波不稳定性).

(3) **交换耦合项**V_{ijji}.

该项能引起电子自旋之间的磁关联. 为此我们引入电子自旋算符的二次量子化形式. 因总自旋

$$\hat{\underline{S}} = \int \mathrm{d}^3x\hat{\psi}^+(\underline{x})\frac{\underline{\sigma}}{2}\hat{\psi}(\underline{x}) = \frac{1}{2}\sum_i \hat{c}^+_{i\alpha}\underline{\sigma}_{\alpha\beta}\hat{c}_{i\beta} = \sum_i \hat{\underline{S}}_i$$

其中, 角标 α, β 为自旋指标, 故格位 i 上的电子自旋算符为

$$\hat{\underline{S}}_i = \frac{1}{2}\hat{c}^+_{i\alpha}\underline{\sigma}_{\alpha\beta}\hat{c}_{i\beta} \tag{1.4.59}$$

利用关系式

$$\underline{\sigma}_{\alpha\beta}\cdot\underline{\sigma}_{\gamma\delta} = 2\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma} - \delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} \tag{1.4.60}$$

可得交换耦合项对应的哈密顿为

$$\sum_{\langle ij\rangle} V_{ijji}\hat{c}^+_{i\sigma}\hat{c}^+_{j\sigma'}\hat{c}_{i\sigma'}\hat{c}_{j\sigma} = -2\sum_{\langle ij\rangle} J_{ij}\left(\hat{\underline{S}}_i\cdot\hat{\underline{S}}_j + \frac{1}{4}\hat{n}_i\hat{n}_j\right) \tag{1.4.61}$$

其中, $J_{ij} \equiv V_{ijji}$. 显然, 式 (1.4.61) 表明该项有使相邻自旋之间产生弱的铁磁耦合 ($J_{ij} > 0$ 时) 的趋势.

最后, 为了以后的需要, 我们考虑在**超立方点阵中** $U = 0$ **时的自由传导电子的能谱**, 此时自旋可忽略. 由式 (1.4.25) 知

$$t_{\underline{l}} = \frac{1}{N}\sum_{\underline{k}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{k}\cdot\underline{l}}\varepsilon_{\underline{k}} \tag{1.4.62}$$

其中, $\underline{l}$ 代表连接相邻格位的位矢. 取格间距为 1, 令 $k_l \equiv \underline{k}\cdot\underline{l}$, 则有

$$\varepsilon_{\underline{k}} = -\sum_{\underline{l}} t\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\underline{k}\cdot\underline{l}} = -2t\sum_{l=1}^{d}\cos k_l \tag{1.4.63}$$

其中, 我们应用了式 (1.4.56) 的结果.

四、激子

(一) 空穴

在场论中, 无粒子真空态 $|0\rangle$ 被定义为

$$\hat{c}_{\underline{p}\alpha}|0\rangle = 0 \quad (\forall \underline{p}, \alpha) \tag{1.4.64}$$

但是在固体物理中, 有兴趣的基态却不是无任何粒子的真空态. 例如, 无相互作用费米子体系的基态就是直到**费米能量**ε_{F} 的所有单粒子态都被占据而所有能量大于 ε_{F} 的单粒子态都空着的状态. 这种**新基态**也可以称为 "物理真空", 记为 $|\varphi_0\rangle$. 由此知

$$\hat{c}_{\underline{p}\alpha}|\varphi_0\rangle = 0 \quad (E > \varepsilon_{\mathrm{F}}) \tag{1.4.65}$$

$$\hat{c}^{+}_{\underline{p}\alpha}|\varphi_0\rangle = 0 \quad (E < \varepsilon_{\mathrm{F}}) \tag{1.4.66}$$

如果移除一个处于能量小于 ε_{F} 的状态中的电子, 则出现的一个空态的行为如同一个有同样质量的粒子但却带有正电荷, 称为**空穴**.

可将粒子 $(E > \varepsilon_{\mathrm{F}})$ 和空穴 $(0 < E < \varepsilon_{\mathrm{F}})$ 的产生和消灭算符分别表示如下：

$$\hat{c}_{\underline{p}\alpha}, \quad \hat{c}^{+}_{\underline{p}\alpha} \quad (E > \varepsilon_{\mathrm{F}}) \tag{1.4.67}$$

$$\begin{cases} \hat{d}_{\underline{p}\alpha} = \hat{c}^{+}_{\underline{p}\alpha} \\ \hat{d}^{+}_{\underline{p}\alpha} = \hat{c}_{\underline{p}\alpha} \end{cases} \quad (0 < E < \varepsilon_{\mathrm{F}}) \tag{1.4.68}$$

很易验证 $\hat{d}_{\underline{p}\alpha}$ 和 $\hat{d}^{+}_{\underline{p}\alpha}$ 仍然分别满足消灭和产生算符的标准的反对易关系. 由式 (1.4.65) 和式 (1.4.66) 可导出

$$\hat{c}_{\underline{p}\alpha}|\varphi_0\rangle = \hat{d}_{\underline{p}\alpha}|\varphi_0\rangle = 0 \quad (\forall \underline{p}, \alpha) \tag{1.4.69}$$

对于新基态, $\hat{c}$ 和 $\hat{d}$ 才是消灭算符. 新基态就是既无粒子又无空穴的状态.

这样无相互作用费米子体系的场算符的如下展开式：

$$\hat{\psi}_{\alpha}(\underline{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\underline{p}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(Et - \underline{p}\cdot\underline{x})} \hat{c}_{\underline{p}\alpha} \tag{1.4.70}$$

就可以改写为

$$\hat{\psi}_{\alpha}(\underline{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\underline{p}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(Et - \underline{p}\cdot\underline{x})} [\hat{c}_{\underline{p}\alpha}\theta(|\underline{p}| - p_{\mathrm{F}}) + \hat{d}^{+}_{\underline{p}\alpha}\theta(p_{\mathrm{F}} - |\underline{p}|)] \tag{1.4.71}$$

或

$$\hat{\psi}_{\alpha}(\underline{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\underline{p}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{p}\cdot\underline{x}} [\hat{c}_{\underline{p}\alpha}\theta(|\underline{p}| - p_{\mathrm{F}}) + \hat{d}^{+}_{\underline{p}\alpha}\theta(p_{\mathrm{F}} - |\underline{p}|)] \tag{1.4.72}$$

其中, $p_{\mathrm{F}} \equiv |\underline{p}_{\mathrm{F}}|$ 是费米动量的绝对值. 在以后章节中我们将要应用上式来研究零温费米子体系以及金属的电子气模型.

对于非导体 (绝缘晶体、半导体), 我们假设基态是价带 (valence band) 全部被电子填满 (满带) 而导带 (conduction band) 全空着 (空带) 的状态, 记为 $|\Phi_{\mathbf{V}}\rangle$. 与前面的讨论类似, 从满带中移除一个态 $\underline{p}$ 中的电子后, 这个空着的态也描述一个空穴. 设价带 $\mathbf{V}$ 中的电子的产生和消灭算符分别为 $\hat{c}^{+}_{\mathbf{V}\underline{p}}$ 和 $\hat{c}_{\mathbf{V}\underline{p}}$ (其中, 下标 $\mathbf{V}$ 表示是价带, 并且由于以下讨论中不涉及自旋, 所以暂时略去自旋指标.), 那么空穴的产生和消灭算符为

$$\hat{d}_{\underline{p}} = \hat{c}^{+}_{\mathbf{V}\underline{p}}, \quad \hat{d}^{+}_{\underline{p}} = \hat{c}_{\mathbf{V}\underline{p}} \tag{1.4.73}$$

而对于基态 $|\Phi_{\mathbf{V}}\rangle$, 应满足

$$\hat{d}_{\underline{p}}|\Phi_{\mathbf{V}}\rangle = 0 \quad (\forall \underline{p}) \tag{1.4.74}$$

在本节中我们约定将导带中的电子的产生和消灭算符 $\hat{c}^{+}_{\mathbf{C}\underline{p}}$ 和 $\hat{c}_{\mathbf{C}\underline{p}}$ (其中, 下标 $\mathbf{C}$ 表示导带) 分别简记为 $\hat{c}^{+}_{\underline{p}}$ 和 $\hat{c}_{\underline{p}}$.

电子和空穴算符各自满足标准的反对易关系, 且电子算符 $\hat{c}_{\underline{p}}$、$\hat{c}^{+}_{\underline{p}}$ 与任何空穴算符 $\hat{d}_{\underline{p}}$、$\hat{d}^{+}_{\underline{p}}$ 总是反对易的.

场算符有如下展开式:

$$\hat{\psi}(\underline{x}) = \sum_{\underline{p}} [\hat{c}_{\underline{p}}\varphi_{\mathbf{C}\underline{p}}(\underline{x}) + \hat{d}^{+}_{\underline{p}}\varphi_{\mathbf{V}\underline{p}}(\underline{x})] \tag{1.4.75}$$

其中, $\varphi_{\mathbf{C}\underline{p}}(\underline{x})$ 和 $\varphi_{\mathbf{V}\underline{p}}(\underline{x})$ 分别是导带和价带的正交归一化波函数. 它们可以由能带论的计算来确定, 这里我们假设它是已知的.

(二) 电子与空穴的相互作用

当价带电子吸收光子跃迁至导带时, 会产生电子空穴对. 根据所吸收光子的能量的不同, 所产生的电子和空穴的运动可能是自由的, 也可能电子和空穴结合在束缚态中 (由它们之间的库仑作用) 而形成所谓的 "**激子**". 下面讨论电子和空穴之间的这种相互作用哈密顿的场论表述.

尽管由于价带电子跃迁到导带会产生相同数目的电子和空穴, 但是通过施加电流等也可以引进荷电粒子, 所以我们容许导带中的电子数可以不同于价带中的空穴数. 为了研究电子和空穴之间的相互作用, 我们还作出如下近似: 设导带中的电子数和价带中的空穴数各自独立地保持着. 这是因为我们假设此时价带和导带之间的任何真实的跃迁已经停止, 忽略虚跃迁过程. 这样哈密顿中应该去掉包含有如 $\hat{c}^{+}_{\underline{p}_1}\hat{c}^{+}_{\underline{p}_2}\hat{d}^{+}_{\underline{p}_3}\hat{d}^{+}_{\underline{p}_4}$ 和 $\hat{c}_{\underline{p}_1}\hat{c}_{\underline{p}_2}\hat{d}_{\underline{p}_3}\hat{d}_{\underline{p}_4}$ 之类的项.

当我们利用导带和价带的正交归一化波函数 $\varphi_{\mathbf{C}\underline{p}}(\underline{x})$ 和 $\varphi_{\mathbf{V}\underline{p}}(\underline{x})$ 来构建库仑相互作用矩阵元时, 表示该矩阵元的动量角标必须区分是对应于导带或是对应于价

带, 为此我们特**约定**在对应价带时的动量角标上面带上 “~” 号 (如 $\underline{\tilde{p}}$ 或 $\underline{\tilde{k}}$ 等), 以便与不带 “~” 号的对应于导带的动量相区别. 借助于这个约定, 下面一些库仑相互作用矩阵元可采用如下记号:

$$\iint \mathrm{d}^3x\mathrm{d}^3y\varphi^*_{\mathbf{C}\underline{p}_1}(\underline{x})\varphi^*_{\mathbf{V}\underline{p}_2}(\underline{y})\frac{e^2}{|\underline{x}-\underline{y}|}\varphi_{\mathbf{C}\underline{p}_3}(\underline{y})\varphi_{\mathbf{V}\underline{p}_4}(\underline{x}) \equiv V_{\underline{p}_1\underline{\tilde{p}}_2\underline{p}_3\underline{\tilde{p}}_4}$$
$$\iint \mathrm{d}^3x\mathrm{d}^3y\varphi^*_{\mathbf{V}\underline{p}_1}(\underline{x})\varphi^*_{\mathbf{V}\underline{p}_2}(\underline{y})\frac{e^2}{|\underline{x}-\underline{y}|}\varphi_{\mathbf{V}\underline{p}_3}(\underline{y})\varphi_{\mathbf{V}\underline{p}_4}(\underline{x}) \equiv V_{\underline{\tilde{p}}_1\underline{\tilde{p}}_2\underline{\tilde{p}}_3\underline{\tilde{p}}_4} \quad (1.4.76)$$

等.

将式 (1.4.75) 代入哈密顿

$$\hat{H} = \int \mathrm{d}^3x\hat{\psi}^+(\underline{x})\left[-\frac{1}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2 + V_L(\underline{x})\right]\hat{\psi}(\underline{x}) + \frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3x\mathrm{d}^3y\hat{\psi}^+(\underline{x})\hat{\psi}^+(\underline{y})\frac{e^2}{|\underline{x}-\underline{y}|}\hat{\psi}(\underline{y})\hat{\psi}(\underline{x}) \quad (1.4.77)$$

然后重新安排算符次序, 使得产生算符总是在消灭算符的左边 (称为正规次序); 这个过程中要利用费米算符的反对易关系、$\varphi_{\mathbf{C}\underline{p}}(\underline{x})$ 和 $\varphi_{\mathbf{V}\underline{p}}(\underline{x})$ 的正交归一关系以及问题的平移不变性. 经过较为冗长但却平庸的整理, 在上述所作近似下, 哈密顿可以写成如下形式:

$$\hat{H} = \hat{H}_{\mathrm{e}} + \hat{H}_{\mathrm{h}} + \hat{H}_{\mathrm{e\text{-}e}} + \hat{H}_{\mathrm{h\text{-}h}} + \hat{H}_{\mathbf{V}} + \hat{H}_{\mathrm{e\text{-}h}} \quad (1.4.78)$$

式中, 右端各项分别如下:

(1) 导带电子的哈密顿 $\hat{H}_{\mathrm{e}}$(但不计及电子之间以及电子与空穴之间的相互作用):

$$\hat{H}_{\mathrm{e}} = \sum_{\underline{p}} \hat{c}^+_{\underline{p}}\hat{c}_{\underline{p}}E^{(\mathrm{C})}_{\underline{p}} \quad (1.4.79)$$

其中

$$E^{(\mathrm{C})}_{\underline{p}} = \int \mathrm{d}^3x\varphi^*_{\mathbf{C}\underline{p}}(\underline{x})\left[-\frac{1}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2 + V(\underline{x})\right]\varphi_{\mathbf{C}\underline{p}}(\underline{x}) + \sum_{\underline{\tilde{p}}'}\left(V_{\underline{p}\underline{\tilde{p}}'\underline{\tilde{p}}'\underline{p}} - V_{\underline{\tilde{p}}'\underline{p}\underline{\tilde{p}}'\underline{p}}\right) \quad (1.4.80)$$

在许多实验上重要的情形, 导带电子位于导带边缘. 因此可以将 $E^{(\mathrm{C})}_{\underline{p}}$ 展开成如下形式:

$$E^{(\mathrm{C})}_{\underline{p}} = E^{(\mathrm{C})}_0 + \frac{\underline{p}^2}{2m^*_{\mathrm{C}}} \quad (1.4.81)$$

其中, m^*_{C} 是导带电子的有效质量.

(2) 空穴的哈密顿 $\hat{H}_{\mathrm{h}}$ (但不计及空穴之间以及空穴与电子之间的相互作用):

$$\hat{H}_{\mathrm{h}} = -\sum_{\underline{p}} \hat{d}^+_{\underline{p}}\hat{d}_{\underline{p}}E^{(d)}_{\underline{p}} \quad (1.4.82)$$

$$E_{\underline{p}}^{(d)}=\int \mathrm{d}^3x\varphi^*_{\mathbf{V}\underline{p}}(\underline{x})\left[-\frac{1}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2+V(\underline{x})\right]\varphi_{\mathbf{V}\underline{p}}(\underline{x})+\sum_{\underline{p}'}\left(V_{\underline{\tilde{p}}\underline{\tilde{p}}'\underline{\tilde{p}}'\underline{\tilde{p}}}-V_{\underline{\tilde{p}}'\underline{\tilde{p}}\underline{\tilde{p}}'\underline{\tilde{p}}}\right) \tag{1.4.83}$$

同样在许多实验上重要的情形, 价带空穴位于价带顶边缘. 因此可以将 $E_{\underline{p}}^{(d)}$ 展开成如下形式:

$$E_{\underline{p}}^{(d)}=E_0^{(d)}-\frac{\underline{p}^2}{2m_{\mathrm{V}}^*} \tag{1.4.84}$$

其中, m_{V}^* 是空穴的有效质量.

(3) 导带中电子–电子相互作用 $\hat{H}_{\text{e-e}}$:

$$\hat{H}_{\text{e-e}}=\frac{1}{2}\sum_{\underline{p}_1\underline{p}_2\underline{p}_3\underline{p}_4}\hat{c}^+_{\underline{p}_1}\hat{c}^+_{\underline{p}_2}\hat{c}_{\underline{p}_3}\hat{c}_{\underline{p}_4}V_{\underline{p}_1\underline{p}_2\underline{p}_3\underline{p}_4} \tag{1.4.85}$$

(4) 价带中空穴–空穴相互作用 $\hat{H}_{\text{h-h}}$:

$$\hat{H}_{\text{h-h}}=\frac{1}{2}\sum_{\underline{p}_1\underline{p}_2\underline{p}_3\underline{p}_4}\hat{d}^+_{\underline{p}_3}\hat{d}^+_{\underline{p}_4}\hat{d}_{\underline{p}_1}\hat{d}_{\underline{p}_2}V_{\underline{\tilde{p}}_1\underline{\tilde{p}}_2\underline{\tilde{p}}_3\underline{\tilde{p}}_4} \tag{1.4.86}$$

(5) 满价带的哈密顿 (对应一个无算符的能量常数)$\hat{H}_{\mathbf{V}}$:

$$\hat{H}_{\mathbf{V}}=\sum_{\underline{p}}\int \mathrm{d}^3x\varphi^*_{\mathbf{V}\underline{p}}(\underline{x})\left[-\frac{1}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2+V(\underline{x})\right]\varphi_{\mathbf{V}\underline{p}}(\underline{x})+\frac{1}{2}\sum_{\underline{p},\underline{p}'}\left(V_{\underline{\tilde{p}}\underline{\tilde{p}}'\underline{\tilde{p}}'\underline{\tilde{p}}}-V_{\underline{\tilde{p}}\underline{\tilde{p}}'\underline{\tilde{p}}\underline{\tilde{p}}'}\right) \tag{1.4.87}$$

(6) **电子–空穴相互作用**$\hat{H}_{\text{e-h}}$:

$$\hat{H}_{\text{e-h}}=\sum_{\underline{p}_1\underline{p}_2\underline{p}_3\underline{p}_4}(-1)\hat{c}^+_{\underline{p}_1}\hat{c}_{\underline{p}_4}\hat{d}^+_{\underline{p}_3}\hat{d}_{\underline{p}_2}V_{\underline{p}_1\underline{\tilde{p}}_2\underline{\tilde{p}}_3\underline{p}_4}+\sum_{\underline{p}_1\underline{p}_2\underline{p}_3\underline{p}_4}\hat{c}^+_{\underline{p}_2}\hat{c}_{\underline{p}_4}\hat{d}^+_{\underline{p}_3}\hat{d}_{\underline{p}_1}V_{\underline{\tilde{p}}_1\underline{p}_2\underline{\tilde{p}}_3\underline{p}_4} \tag{1.4.88}$$

其中, 等号右端第一项的负号是空穴带正电的反映 (注意 V 中含有 e^2). 右端第一项描述了电子–空穴的库仑相互作用, 而右端第二项描述了库仑交换作用. 电子–空穴相互作用对于半导体性质有极其重要的影响.

(三) 激子

当空穴和电子结合在束缚态而形成 “激子” 时, 若空穴和电子之间的距离 (激子半径) 比晶格常数大很多倍, 空穴和电子之间的束缚较弱, 这类激子称为**万尼尔激子**. 这种情形下, 场算符 $\hat{\psi}^+(\underline{x})$ 和 $\hat{\psi}(\underline{x})$ 可以按布洛赫波展开. (注意在上一小节中讨论电子–空穴相互作用时, 所作的忽略能带之间的虚跃迁的近似会导致在万尼尔激子的问题中不出现应该有的介电常数.) 当激子半径小于或约等于晶格常数时, 就属于紧束缚的电子空穴对, 这类激子称为弗仑克尔 **(Frenkel) 激子**. 尽管万尼尔激子更经常被观测到从而也许是使人们更有兴趣的, 但是从定性的物理观念以及场

论应用的目的出发 (包括后面对 “极化激元” 等的讨论), 我们以下的讨论将仅以弗仑克尔激子为例. 对于这种情形, 场算符就不能按布洛赫波展开, 而应该按万尼尔函数 (或更简单地按原子函数) 来展开, 即

$$\hat{\psi}(\underline{x}) = \sum_{\underline{l}} \hat{d}_{\underline{l}}^{+} w_{\mathbf{V}}(\underline{x}-\underline{l}) + \sum_{\underline{l}} \hat{c}_{\underline{l}} w_{\mathbf{C}}(\underline{x}-\underline{l}) \tag{1.4.89}$$

$$\hat{\psi}^{+}(\underline{x}) = \sum_{\underline{l}} \hat{d}_{\underline{l}} w_{\mathbf{V}}^{*}(\underline{x}-\underline{l}) + \overset{+}{\sum_{\underline{l}}} \hat{c}_{\underline{l}}^{+} w_{\mathbf{C}}^{*}(\underline{x}-\underline{l}) \tag{1.4.90}$$

其中, $w_{\mathbf{V}}(\underline{x}-\underline{l})$ 和 $w_{\mathbf{C}}(\underline{x}-\underline{l})$ 分别是价带和导带中的万尼尔函数, 电子和空穴算符仍然与以前的约定相同. 我们进一步作如下简化假设:

(1) 电子动能算符与势能算符的和 $\hat{H}_0^{\mathrm{QM}} = -\boldsymbol{\nabla}^2/(2m) + V_{\mathrm{L}}(\underline{x})$ 不会引起不同能带之间的跃迁.

(2) 波函数的交叠可以忽略.

(3) 仅考虑这样的波函数, 使得只有一个电子空穴对产生. 从而在价带中不会消灭两次电子, 导带中也不会产生两次电子.

考虑导带和价带的万尼尔函数 $w_{\mathbf{V}}(\underline{x}-\underline{l})$ 和 $w_{\mathbf{C}}(\underline{x}-\underline{l})$ 所形成的如下矩阵元:

$$\langle j\underline{l}|\hat{H}_0^{\mathrm{QM}}|j'l'\rangle = \int \mathrm{d}^3x w_j^{*}(\underline{x}-\underline{l})\left[-\frac{1}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2 + V_L(\underline{x})\right] w_{j'}(\underline{x}-\underline{l}')$$

$$\begin{aligned} &\langle j_1\underline{l}_1, j_2\underline{l}_2|V(\underline{x}-\underline{x}')|j_3\underline{l}_3, j_4\underline{l}_4\rangle \\ = &\int \mathrm{d}^3x\mathrm{d}^3x' w_{j_1}^{*}(\underline{x}-\underline{l}_1) w_{j_2}^{*}(\underline{x}'-\underline{l}_2)\frac{e^2}{|\underline{x}-\underline{x}'|} w_{j_3}(\underline{x}'-\underline{l}_3) w_{j_4}(\underline{x}-\underline{l}_4) \end{aligned} \tag{1.4.91}$$

其中, $j = \mathbf{C}, \mathbf{V}$ 是能带指标.

根据简化假设 (1) 可知, 在矩阵元 $\langle j\underline{l}|\hat{H}_0^{\mathrm{QM}}|j'l'\rangle$ 中, $j = j'$. 根据简化假设 (2) 可知, 在库仑势的矩阵元 $\langle j_1\underline{l}_1, j_2\underline{l}_2|V(\underline{x}-\underline{x}')|j_3\underline{l}_3, j_4\underline{l}_4\rangle$ 中, 应满足 $\underline{l}_1 = \underline{l}_4 = \underline{l}$ 及 $\underline{l}_2 = \underline{l}_3 = \underline{l}'$, 再从简化假设 (3) 可知, 在库仑势的矩阵元中应该有 $j_1 \neq j_2$ 和 $j_3 \neq j_4$.

为了使得符号和公式更为紧凑, 我们把上述矩阵元改写成如下的角标形式, 其中, 原矩阵元中的指标 $\mathbf{C}\underline{l}$ 改成角标 $\underline{l}$, $\mathbf{V}\underline{l}$ 改成角标 $\tilde{\underline{l}}$ 等. 例如:

$$\langle \mathbf{V}\underline{l}|\hat{H}_0^{\mathrm{QM}}|\mathbf{V}\underline{l}'\rangle = H^0_{\tilde{\underline{l}}\tilde{\underline{l}}'}, \quad \langle \mathbf{C}\underline{l}|\hat{H}_0^{\mathrm{QM}}|\mathbf{C}\underline{l}'\rangle = H^0_{\underline{l}\underline{l}'}$$

$$\langle \mathbf{V}\underline{l}, \mathbf{C}\underline{l}'|V(\underline{x}-\underline{x}')|\mathbf{V}\underline{l}', \mathbf{C}\underline{l}\rangle = V_{\tilde{\underline{l}}\underline{l}'\tilde{\underline{l}}'\underline{l}} \tag{1.4.92}$$

等.

哈密顿仍然是式 (1.4.77), 现在把场算符展开式 (1.4.89) 和式 (1.4.90) 代入哈密顿中, 利用上面的简化假设并把每项写成正规次序, 则得

$$
\begin{aligned}
\hat{H} = & \sum_{\underline{l}\underline{l}'} \hat{c}^{+}_{\underline{l}} \hat{c}_{\underline{l}'} H^{(\mathbf{C})}_{\underline{l}\underline{l}'} + \sum_{\underline{l}\underline{l}'} \hat{d}^{+}_{\underline{l}} \hat{d}_{\underline{l}'} H^{(\mathbf{V})}_{\underline{l}\underline{l}'} + \sum_{\underline{l}\underline{l}'} \hat{c}^{+}_{\underline{l}'} \hat{c}_{\underline{l}} \hat{d}^{+}_{\underline{l}'} \hat{d}_{\underline{l}} V_{\underline{\tilde{l}l'}\,\underline{\tilde{l}}'\,\underline{l}} \\
& - \sum_{\underline{l}\underline{l}'} \hat{c}^{+}_{\underline{l}'} \hat{c}_{\underline{l}'} \hat{d}^{+}_{\underline{l}} \hat{d}_{\underline{l}} V_{\underline{\tilde{l}l'}\,\underline{l}'\,\underline{\tilde{l}}} + \mathrm{const}
\end{aligned}
\tag{1.4.93}
$$

其中

$$
\begin{aligned}
H^{(\mathbf{C})}_{\underline{l}\underline{l}'} &= H^{0}_{\underline{l}\underline{l}'} + \delta_{\underline{l}\underline{l}'} \left(\sum_{\underline{m}} V_{\underline{\tilde{m}}\,\underline{l}\,\underline{l}\,\underline{\tilde{m}}} - V_{\underline{\tilde{l}l\tilde{l}l}} \right) \\
H^{(\mathbf{V})}_{\underline{l}\underline{l}'} &= -H^{0}_{\underline{\tilde{l}}'\underline{\tilde{l}}} \\
\mathrm{const} &= \sum_{\underline{l}} H^{(\mathbf{V})}_{\underline{l}\underline{l}}
\end{aligned}
\tag{1.4.94}
$$

该哈密顿式 (1.4.93) 右端第一项是电子从格位 $\underline{l}'$ 到格位 $\underline{l}$ 的独立的迁徙项; 第二项是空穴的独立的迁徙项; 第三项中含有 $\hat{c}^{+}_{\underline{l}'} \hat{c}_{\underline{l}} \hat{d}^{+}_{\underline{l}'} \hat{d}_{\underline{l}} = \hat{c}^{+}_{\underline{l}'} \hat{d}^{+}_{\underline{l}'} \hat{d}_{\underline{l}} \hat{c}_{\underline{l}}$, 它描述一个电子空穴对从 $\underline{l}$ 到 $\underline{l}'$ 的耦合迁徙; 第四项不描述任何迁徙, 而是反映了 $\underline{l}$ 处的空穴与 $\underline{l}'$ 处的电子之间的库仑 (吸引) 相互作用; 最后一项是与电子及空穴算符无关的常数, 通常可以忽略.

在实际中, 电子和空穴到底处于何种运动形式依赖于右端各项的相对大小. 现在我们来了解在弗仑克尔激子情形, 哈密顿应该满足的条件和所具有的形式. 首先引入激子的产生和消灭算符 $\hat{B}^{+}_{\underline{l}}$ 和 $\hat{B}_{\underline{l}}$:

$$
\hat{B}^{+}_{\underline{l}} = \hat{c}^{+}_{\underline{l}} \hat{d}^{+}_{\underline{l}}, \quad \hat{B}_{\underline{l}} = \hat{d}_{\underline{l}} \hat{c}_{\underline{l}}
\tag{1.4.95}
$$

这样式 (1.4.93) 右端第三项可写成 $\sum\limits_{\underline{l}\underline{l}'} \hat{B}^{+}_{\underline{l}'} \hat{B}_{\underline{l}} V_{\underline{\tilde{l}l'}\,\underline{\tilde{l}}'\,\underline{l}}$. 如前所述, 它描述激子的迁徙. 其次考虑到, 若将右端第四项作用于任一激子态

$$
\hat{B}^{+}_{\underline{m}} |\varPhi_{\mathbf{V}}\rangle = \hat{c}^{+}_{\underline{m}} \hat{d}^{+}_{\underline{m}} |\varPhi_{\mathbf{V}}\rangle
\tag{1.4.96}
$$

上时, 则会发现当且仅当 $\underline{l} = \underline{m}$, $\underline{l}' = \underline{m}$ 时, $\hat{c}^{+}_{\underline{l}'} \hat{c}_{\underline{l}'} \hat{d}^{+}_{\underline{l}} \hat{d}_{\underline{l}} \hat{c}^{+}_{\underline{m}} \hat{d}^{+}_{\underline{m}} |\varPhi_{\mathbf{V}}\rangle$ 才不等于零, 由此知第四项可取 $\underline{l} = \underline{l}'$, 而将其改写成

$$
-\sum_{\underline{l}} \hat{c}^{+}_{\underline{l}} \hat{c}_{\underline{l}} \hat{d}^{+}_{\underline{l}} \hat{d}_{\underline{l}} V_{\underline{\tilde{l}l\tilde{l}}} = -\sum_{\underline{l}} \hat{B}^{+}_{\underline{l}} \hat{B}_{\underline{l}} V_{\underline{\tilde{l}l\tilde{l}}}
\tag{1.4.97}
$$

显然该项仅对激子的能量做出贡献而与激子的迁徙无关. 最后将式 (1.4.93) 右端第一项作用于任一激子态上, 有

$$
\hat{c}^{+}_{\underline{l}} \hat{c}_{\underline{l}'} \hat{B}^{+}_{\underline{m}} |\varPhi_{\mathbf{V}}\rangle = \delta_{\underline{l}'\underline{m}} \hat{c}^{+}_{\underline{l}} \hat{d}^{+}_{\underline{m}} |\varPhi_{\mathbf{V}}\rangle
$$

若 $\underline{l} \neq \underline{m}$, 则是一个全新的状态, 即描述电子独立地迁徙. 由此可见当 $\underline{l} \neq \underline{m}$ 时, 第一项对弗仑克尔激子的形成是不利的, 因而我们要求 $\underline{l} \neq \underline{m}$ 时的 $H^{(\mathbf{C})}_{\underline{l}\underline{l}'}$ 很小而可以忽略. 这样我们仅需保留 $\underline{l} = \underline{m}$ 的项, 右端第一项就可以写成 $\sum\limits_{\underline{l}} \hat{c}^+_{\underline{l}} \hat{c}_{\underline{l}} H^{(\mathbf{C})}_{\underline{l}\underline{l}}$. 注意到 $\hat{c}^+_{\underline{l}} \hat{c}_{\underline{l}}$ 和 $\hat{B}^+_{\underline{l}} \hat{B}_{\underline{l}}$ 对任一激子态 $\hat{B}^+_{\underline{m}} |\varPhi_{\mathbf{V}}\rangle$ 的作用是等效的. 因

$$\hat{c}^+_{\underline{l}} \hat{c}_{\underline{l}} \hat{B}^+_{\underline{m}} |\varPhi_{\mathbf{V}}\rangle = \delta_{\underline{l}\,\underline{m}} \hat{c}^+_{\underline{l}} \hat{d}^+_{\underline{m}} |\varPhi_{\mathbf{V}}\rangle$$

另外

$$\hat{B}^+_{\underline{l}} \hat{B}_{\underline{l}} \hat{B}^+_{\underline{m}} |\varPhi_{\mathbf{V}}\rangle = \hat{c}^+_{\underline{l}} \hat{d}^+_{\underline{l}} \hat{d}_{\underline{l}} \hat{c}_{\underline{l}} \hat{c}^+_{\underline{m}} \hat{c}_{\underline{m}} |\varPhi_{\mathbf{V}}\rangle$$

再利用正则对易关系和 $\hat{c}_{\underline{l}} |\varPhi_{\mathbf{V}}\rangle = \hat{d}_{\underline{l}} |\varPhi_{\mathbf{V}}\rangle = 0 (\forall \underline{l})$, 可得

$$\hat{B}^+_{\underline{l}} \hat{B}_{\underline{l}} \hat{B}^+_{\underline{m}} |\varPhi_{\mathbf{V}}\rangle = \delta_{\underline{l}\,\underline{m}} \hat{c}^+_{\underline{l}} \hat{d}^+_{\underline{m}} |\varPhi_{\mathbf{V}}\rangle$$

故可以进一步将式 (1.4.93) 右端第一项改写成

$$\sum_{\underline{l}} \hat{B}^+_{\underline{l}} \hat{B}_{\underline{l}} H^{(\mathbf{C})}_{\underline{l}\underline{l}} \equiv \sum_{\underline{l}} \hat{B}^+_{\underline{l}} \hat{B}_{\underline{l}} E^{(\mathrm{C})}_0$$

其中, $E^{(\mathrm{C})}_0 = H^{(\mathbf{C})}_{\underline{l}\underline{l}}$, 由于 $H^{(\mathbf{C})}_{\underline{l}\,\underline{m}}$ 仅依赖于差值 $\underline{l} - \underline{m}$, 故 $E^{(\mathrm{C})}_0$ 与 $\underline{l}$ 无关. 类似地, 式 (1.4.93) 右端第二项也可以写成如下形式: $\sum\limits_{\underline{l}} \hat{B}^+_{\underline{l}} \hat{B}_{\underline{l}} E^{(\mathrm{V})}_0$. 这样式 (1.4.93) 最终可取成如下形式:

$$\hat{H} = \sum_{\underline{l}} \hat{B}^+_{\underline{l}} \hat{B}_{\underline{l}} E^{(\mathrm{tot})}_0 + \sum_{\underline{l},\underline{l}'} \hat{B}^+_{\underline{l}'} \hat{B}_{\underline{l}} V(\underline{l} - \underline{l}') \tag{1.4.98}$$

其中

$$\begin{aligned} E^{(\mathrm{tot})}_0 &= E^{(\mathrm{C})}_0 + E^{(\mathrm{V})}_0 - V_{\underline{\tilde{l}l}\underline{l}\underline{\tilde{l}}} \\ V(\underline{l} - \underline{l}') &= V_{\underline{\tilde{l}}\underline{l}'\underline{\tilde{l}}'\underline{l}} \end{aligned} \tag{1.4.99}$$

最后一式已经利用了仅依赖于差值 $\underline{l} - \underline{l}'$ 的性质. 哈密顿中我们也略去了无关紧要的常数项.

可以通过傅里叶变换将哈密顿式 (1.4.98) 对角化, 令

$$\hat{B}^+_{\underline{l}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\underline{k}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\underline{k}\cdot\underline{l}} \hat{B}^+_{\underline{k}}, \quad \hat{B}_{\underline{l}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\underline{k}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{k}\cdot\underline{l}} \hat{B}_{\underline{k}} \tag{1.4.100}$$

代入式 (1.4.98), 则得

$$\hat{H} = \sum_{\underline{k}} E_{\underline{k}} \hat{B}^+_{\underline{k}} \hat{B}_{\underline{k}} \tag{1.4.101}$$

其中

$$E_{\underline{k}} = E_0^{(\mathrm{tot})} + V(\underline{k}) \tag{1.4.102}$$

而 $V(\underline{k})$ 是 $V(\underline{l}-\underline{l}')$ 的傅里叶变换. 前面的结果虽然表明了激子的准粒子性质, 但还需要进一步了解激子 (它由两个费米子组成) 是否是玻色子. 为此考虑如下对易子：

$$\begin{aligned}\left[\hat{B}_{\underline{k}}, \hat{B}^+_{\underline{k}'}\right] &= \frac{1}{N}\sum_{\underline{l},\underline{l}'} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\underline{k}\cdot\underline{l}-\underline{k}'\cdot\underline{l}')}[\hat{d}_{\underline{l}}\hat{c}_{\underline{l}}, \hat{c}^+_{\underline{l}'}\hat{d}^+_{\underline{l}'}] \\ &= \delta_{\underline{k}\underline{k}'} - \frac{1}{N}\sum_{\underline{l}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\underline{k}-\underline{k}')\cdot\underline{l}}\left(\hat{c}^+_{\underline{l}}\hat{c}_{\underline{l}} + \hat{d}^+_{\underline{l}}\hat{d}_{\underline{l}}\right)\end{aligned} \tag{1.4.103}$$

显然激子并不满足玻色子标准的对易关系. 不过在许多情形, 元激发的数目很小, 或者说组成激子的电子数和空穴数很小 ($\ll N$), 从而式 (1.4.103) 右端第二项可以忽略, 这种情形下的激子才满足玻色子的对易关系. 在高密度激子情形下, 必须注意玻色对易关系的破坏.

五、光子、极化激元

(一) 电磁场的量子化

1. 电磁场方程

考虑真空中的电磁场, 此时磁场强度 $\underline{H}$、电位移 $\underline{D}$、磁感应强度 $\underline{B}$ 以及电场强度 $\underline{E}$ 之间满足 $\underline{H}=\underline{B}$, $\underline{D}=\underline{E}$. 电磁场是相对论性场, 为了明显地反映其理论的相对论不变性, 我们将有源时的电磁场的拉格朗日密度写成

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{16\pi}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} - A_\mu j^\mu \tag{1.4.104}$$

其中, $\mu,\nu=0,1,2,3$, 且重复指标自动求和; 场量 $A^\mu=(A^0,\underline{A})$ 称为四维电磁势, A^0 称为标势, $\underline{A}$ 称为矢势; $F_{\mu\nu}$ 为反称的电磁场张量, 它定义为

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu \tag{1.4.105}$$

$$j^\mu = (\rho, \underline{j}) \tag{1.4.106}$$

其中, j^μ 为四维电流密度; ρ 为电荷密度; $\underline{j}$ 为三维电流密度矢量.

利用拉氏方程

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial A_\nu} - \partial_\mu\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\partial_\mu A_\nu} = 0$$

可得电磁场方程

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = 4\pi j^\nu \tag{1.4.107}$$

由式 (1.4.105) 可直接得出

$$\partial_\lambda F_{\mu\nu} + \partial_\mu F_{\nu\lambda} + \partial_\nu F_{\lambda\mu} = 0 \tag{1.4.108}$$

定义电场强度矢量和磁感应强度为

$$\underline{E} \equiv -\boldsymbol{\nabla} A^0 - \dot{\underline{A}} \tag{1.4.109}$$

$$\underline{B} = \boldsymbol{\nabla} \times \underline{A} \tag{1.4.110}$$

不难验证有

$$F_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & E^1 & E^2 & E^3 \\ -E^1 & 0 & -B^3 & B^2 \\ -E^2 & B^3 & 0 & -B^1 \\ -E^3 & -B^2 & B^1 & 0 \end{pmatrix} \tag{1.4.111}$$

可以证明式 (1.4.107) 和式 (1.4.108) 就是用电磁场张量和四维电流密度表示的**麦克斯韦方程**：

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{\nabla} \cdot \underline{E} = 4\pi\rho \\ &\boldsymbol{\nabla} \cdot \underline{B} = 0 \\ &\boldsymbol{\nabla} \times \underline{E} = -\dot{\underline{B}} \\ &\boldsymbol{\nabla} \times \underline{B} = \dot{\underline{E}} + 4\pi \underline{j} \end{aligned}$$

尽管式 (1.4.107) 和式 (1.4.108) 代表了麦克斯韦方程, 但将式 (1.4.105) 代入式 (1.4.108), 则式 (1.4.108) 只不过是一个恒等式, 即由式 (1.4.105) 求出的任意 $F_{\mu\nu}$ 都满足式 (1.4.108), 所以对于按式 (1.4.105) 求得的场张量, 式 (1.4.107) 已构成了麦克斯韦方程的全部内容.

借助于式 (1.4.105) 可将式 (1.4.107) 写成

$$\partial^2 A^\nu - \partial^\nu \partial \cdot A = 4\pi j^\nu \tag{1.4.112}$$

由式 (1.4.107) 还可以得流守恒方程：

$$\partial_\nu j^\nu = 0 \tag{1.4.113}$$

2. 规范条件

式 (1.4.112) 不能唯一地确定 A^μ, 事实上, 如果作变换

$$A^\mu \longrightarrow A^\mu + \partial^\mu \lambda \tag{1.4.114}$$

则 $F_{\mu\nu}$ 和式 (1.4.112) 均不改变, 故我们把式 (1.4.114) 称为规范变换. 方程的规范不变性反映了并非 A^μ 的所有分量均是动力学变量. 这样我们可以通过规范参量 λ 的适当选择来对 A^μ 施加某种 (规范) 条件.

一种常用的规范是**库仑规范**(或辐射规范). 它是通过下面方程来定义的:

$$\nabla \cdot \underline{A} = 0 \tag{1.4.115}$$

在这种规范条件下, 式 (1.4.112) 可化为

$$\partial^2 A_\nu - \partial_\nu \partial_0 A^0 = 4\pi j_\nu \tag{1.4.116}$$

写成分量形式为

$$\nabla^2 A_0 = -4\pi\rho \tag{1.4.117}$$

$$\partial^2 \underline{A} + \nabla \dot{A}^0 = 4\pi \underline{j} \tag{1.4.118}$$

由泊松方程 (1.4.117) 以及无穷远边界条件, 并注意

$$\nabla^2 \frac{1}{|\underline{x} - \underline{y}|} = -4\pi\delta^3(\underline{x} - \underline{y}) \tag{1.4.119}$$

可得

$$A_0(\underline{x}, t) = \int \mathrm{d}^3 x \frac{1}{|\underline{x} - \underline{y}|} \rho(\underline{y}, t) \tag{1.4.120}$$

这表明在库仑规范中, 标势 A^0 由库仑定律确定. 而三个矢势分量中又要满足式 (1.4.115), 所以仅存在两个独立的场变量. 又由库仑规范条件知, 在这种规范下, $\underline{A}$ 的纵向部分为零, 而仅留下两个横向部分: $\underline{A} = \underline{A}^{\mathrm{t}}$.

3. 自由电磁场及其模解

考虑无外源的自由电磁场, 由式 (1.4.120) 知

$$A_0(\underline{x}, t) = 0 \tag{1.4.121}$$

且式 (1.4.118) 成为

$$\partial^2 \underline{A} = \partial^2 \underline{A}^{\mathrm{t}} = 0 \tag{1.4.122}$$

式 (1.4.122) 显然有如下完全的基本解集:

$$\sqrt{\frac{2\pi}{V\omega_k}} \underline{\varepsilon}(\underline{k}, \lambda) \mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}kx} \quad (\lambda = 1, 2) \tag{1.4.123}$$

其中, 由于库仑规范条件, 必有

$$\underline{k} \cdot \underline{\varepsilon}(\underline{k}, \lambda) = 0 \quad (\lambda = 1, 2) \tag{1.4.124}$$

可选择 $\underline{\varepsilon}(\underline{k},\lambda)$ 的正交归一化条件为

$$\underline{\varepsilon}(\underline{k},\lambda)\cdot\underline{\varepsilon}(\underline{k},\lambda')=\delta_{\lambda\lambda'} \tag{1.4.125}$$

$\underline{\varepsilon}(\underline{k},\lambda)(\lambda=1,2)$ 称为**横极化矢量**.

4. 库仑规范下的量子化

不同的规范下需要不同的量子化程序, 以下我们仅讨论库仑规范. 首先, 和场量 A_i 共轭的动量是电场强度:

$$\pi^i\equiv\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{A}_i}=-\frac{1}{4\pi}F^{0i}=\frac{1}{4\pi}E^i \tag{1.4.126}$$

在库仑规范中, 仅 $\underline{A}^{\mathrm{t}}$ 是动力学变量, 因而我们期待 $\underline{E}^{\mathrm{t}}$ 是它们的共轭动量. 事实上, $\underline{E}$ 的纵向分量 $\underline{E}^{\mathrm{l}}$ 满足 $\boldsymbol{\nabla}\cdot\underline{E}^{\mathrm{l}}=4\pi\rho$. 显然 $\underline{E}^{\mathrm{l}}$ 不是一个共轭动量 (它不是动力学量). 特别在无源情形, 有 $\boldsymbol{\nabla}\cdot\underline{E}=0$, 则 $\underline{E}=\underline{E}^{\mathrm{t}}$ 是纯横向矢量. 所以通常的等时正则对易关系:

$$[(\hat{A}^i)^{\mathrm{t}}(\underline{x},t),-\frac{1}{4\pi}(\hat{E}^j)^{\mathrm{t}}(\underline{y},t)]=\mathrm{i}\delta_{ij}\delta^3(\underline{x}-\underline{y})$$

显然与横向约束条件 $\boldsymbol{\nabla}\cdot\hat{\underline{A}}^{\mathrm{t}}=\boldsymbol{\nabla}\cdot\hat{\underline{E}}^{\mathrm{t}}=0$ 不一致.

为了找到正确的对易关系, 我们必须认识到等时正则对易关系只能用在真正独立的场变量上. 为了分离出独立场量, 把 $\underline{A}^{\mathrm{t}}$ 和 $\underline{E}^{\mathrm{t}}$ 分解成如下形式:

$$\hat{A}^{\mathrm{t}}(\underline{x},t)=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\underline{k}}\hat{\underline{q}}(\underline{k},t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{k}\cdot\underline{x}} \tag{1.4.127}$$

$$-\frac{1}{4\pi}\hat{\underline{E}}^{\mathrm{t}}(\underline{x},t)=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\underline{k}}\hat{\underline{p}}(\underline{k},t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\underline{k}\cdot\underline{x}} \tag{1.4.128}$$

横向条件为

$$\underline{k}\cdot\hat{\underline{q}}(\underline{k},t)=\underline{k}\cdot\hat{\underline{p}}(\underline{k},t)=0 \tag{1.4.129}$$

借助于两个独立的横向极化矢量, 可将 $\underline{q}$ 和 $\underline{p}$ 写成

$$\hat{\underline{q}}(\underline{k},t)=\sum_{\lambda=1}^{2}\hat{q}_{\underline{k}\lambda}(t)\underline{\varepsilon}(\underline{k},\lambda) \tag{1.4.130}$$

$$\hat{\underline{p}}(\underline{k},t)=\sum_{\lambda=1}^{2}\hat{p}_{\underline{k}\lambda}(t)\underline{\varepsilon}(\underline{k},\lambda) \tag{1.4.131}$$

所有系数 $q_{\underline{k}\lambda}(t)$ 和 $p_{\underline{k}\lambda}(t)$ 的集合构成了场的独立的正则坐标和正则动量. 因此我们施加如下正则对易关系:

$$[\hat{q}_{\underline{k}\lambda},\hat{q}_{\underline{k}'\lambda'}]=[\hat{p}_{\underline{k}\lambda},\hat{p}_{\underline{k}'\lambda'}]=0 \tag{1.4.132}$$

$$[\hat{q}_{\underline{k}\lambda}, \hat{p}_{\underline{k}'\lambda'}] = \mathrm{i}\delta^3(\underline{k} - \underline{k}')\delta_{\lambda\lambda'} \quad (\lambda, \lambda' = 1, 2) \tag{1.4.133}$$

代入式 (1.4.127) 和式 (1.4.128) 中得

$$\begin{aligned}\left[\hat{A}_i^{\mathrm{t}}(\underline{x}, t), -\frac{1}{4\pi}\hat{E}_j^{\mathrm{t}}(\underline{y}, t)\right] &= \mathrm{i}\frac{1}{V}\sum_{\underline{k}}\left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{\underline{k}^2}\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{k}\cdot(\underline{x}-\underline{y})} \\ &= \mathrm{i}\left(\delta_{ij} - \frac{\partial_i\partial_j}{\boldsymbol{\nabla}^2}\right)\delta^3(\underline{x} - \underline{y})\end{aligned} \tag{1.4.134}$$

其中, $\dfrac{1}{\boldsymbol{\nabla}^2}$ 的意义为

$$\frac{1}{\boldsymbol{\nabla}^2}\phi(\underline{x}) \equiv \int \mathrm{d}^3x' D(\underline{x} - \underline{x}')\phi(\underline{x}) \tag{1.4.135}$$

而

$$\boldsymbol{\nabla}^2 D(\underline{x}) = \delta^3(\underline{x}) \tag{1.4.136}$$

或明显地写成

$$D(\underline{x}) = -\frac{1}{4\pi|\underline{x}|}$$

故式 (1.4.134) 又可以写成

$$\left[\hat{A}_i^{\mathrm{t}}(\underline{x}, t), -\frac{1}{4\pi}\hat{E}_j^{\mathrm{t}}(\underline{y}, t)\right] = \mathrm{i}\left[\delta_{ij}\delta^3(\underline{x} - \underline{y}) + \partial_i\partial_j\frac{1}{4\pi|\underline{x} - \underline{y}|}\right] \tag{1.4.137}$$

式 (1.4.137) 符合库仑规范条件, 这可由 ∂^i 作用于该式两端, 并注意利用 $\partial^i\partial_i = -\boldsymbol{\nabla}^2$ 得知. 尽管这个量子化规则是与规范相关的并且是非局域的, 但可观测量 $\underline{E}$ 场和 $\underline{B}$ 场之间的量子化关系确实是规范不变的和局域的. 事实上有

$$[\hat{E}_i(\underline{x}, t), \hat{E}_j(\underline{y}, t)] = [\hat{B}_i(\underline{x}, t), \hat{B}_j(\underline{y}, t)] = 0 \tag{1.4.138}$$

$$\begin{aligned}\left[\frac{1}{4\pi}\hat{E}_i(\underline{x}, t), \hat{B}_j(\underline{y}, t)\right] &= \left[\frac{1}{4\pi}\hat{E}_i(\underline{x}, t), \varepsilon_{jkl}\partial_k\hat{A}_l(\underline{y}, t)\right] \\ &= \mathrm{i}\varepsilon_{jkl}\partial_k\left(\delta_{il} - \frac{\partial_i\partial_l}{\boldsymbol{\nabla}^2}\right)\delta^3(\underline{x} - \underline{y}) \\ &= \mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\partial_k\delta^3(\underline{x} - \underline{y})\end{aligned} \tag{1.4.139}$$

现在可以将场量 $A_\mu(\underline{x}, t)$ 按基本解集展开, 得

$$\hat{A}_\mu(\underline{x}, t) = \sqrt{\frac{2\pi}{V\omega_k}}\sum_{\underline{k}}\sum_{\lambda=1}^{2}\varepsilon_{\mu\underline{k}\lambda}\left(\hat{a}_{\underline{k}\lambda}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} + \hat{a}_{\underline{k}\lambda}^{+}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\right) \tag{1.4.140}$$

其中, $\hat{A}_0(\underline{x}, t) = 0$ (无源). 利用基本的正则对易关系, 可直接验证

$$[\hat{a}_{\underline{k}\lambda}, \hat{a}_{\underline{k}'\lambda'}] = [\hat{a}_{\underline{k}\lambda}^{+}, \hat{a}_{\underline{k}'\lambda'}^{+}] = 0 \tag{1.4.141}$$

$$[\hat{a}_{\underline{k}\lambda}, \hat{a}^+_{\underline{k}'\lambda'}] = \delta^3(\underline{k} - \underline{k}')\delta_{\lambda\lambda'} \tag{1.4.142}$$

其中, $\hat{a}$ 和 $\hat{a}^+$ 可解释为光子的消灭和产生算符.

哈密顿算符为

$$\hat{H} \equiv \int \mathrm{d}\underline{x}\mathcal{H} = \sum_{\lambda=1}^{2}\sum_{\underline{k}} \omega_k \left(\hat{a}^+_{\underline{k}\lambda}\hat{a}_{\underline{k}\lambda} + \frac{1}{2}\right) \tag{1.4.143}$$

其中, $\omega_k = |\underline{k}|$. 光子基态为 $|0\rangle$, 它满足

$$\hat{a}_{\underline{k}\lambda}|0\rangle = 0 \quad (\forall \underline{k}, \lambda) \tag{1.4.144}$$

同样可定义单光子态和多光子态. 例如, $|\underline{k}, \lambda\rangle \equiv \hat{a}_{\underline{k}\lambda}|0\rangle, \cdots$

(二) 电子–光子相互作用

当电子与量子光场相互作用时, 其哈密顿应为

$$\hat{H} = \hat{H}^0_{\mathrm{e}} + \hat{H}^0_{\mathrm{light}} + \hat{H}_{\mathrm{e\text{-}e}} + \hat{H}_{\mathrm{e\text{-}light}} \tag{1.4.145}$$

其中, $\hat{H}^0_{\mathrm{e}}$ 为仅受到势场 $V(\underline{x})$ 作用时的电子的哈密顿:

$$\hat{H}^0_{\mathrm{e}} = \int \mathrm{d}^3x \hat{\psi}^+(\underline{x}) \left[-\frac{\boldsymbol{\nabla}^2}{2m} + V(\underline{x})\right]\hat{\psi}(\underline{x}) \tag{1.4.146}$$

$\hat{H}^0_{\mathrm{light}}$ 为上一小节所讨论的自由光子的哈密顿:

$$\hat{H}^0_{\mathrm{light}} = \sum_{\lambda=1}^{2}\sum_{\underline{k}} \omega_k \left(\hat{a}^+_{\underline{k},\lambda}\hat{a}_{\underline{k},\lambda} + \frac{1}{2}\right) \tag{1.4.147}$$

$\hat{H}_{\mathrm{e\text{-}e}}$ 为电子之间的库仑相互作用:

$$\hat{H}_{\mathrm{e\text{-}e}} = \frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3x\mathrm{d}^3y \hat{\psi}^+(\underline{x})\hat{\psi}^+(\underline{y})\frac{e^2}{|\underline{x} - \underline{y}|}\hat{\psi}(\underline{y})\hat{\psi}(\underline{x}) \tag{1.4.148}$$

$\hat{H}_{\mathrm{e\text{-}light}}$ 为电子与光子之间的相互作用. 为了求得 $\hat{H}_{\mathrm{e\text{-}light}}$, 我们利用最小耦合法则:

$$\hat{H}^0_{\mathrm{e}} + \hat{H}_{\mathrm{e\text{-}light}} = \int \mathrm{d}^3x \hat{\psi}^+(\underline{x}) \left[\frac{1}{2m}\left(\underline{\hat{p}} - e\underline{\hat{A}}\right)^2 + V(\underline{x})\right]\hat{\psi}(\underline{x}) \tag{1.4.149}$$

其中, $\underline{\hat{A}}(\underline{x})$ 为矢势, 根据式 (1.4.140) 为

$$\underline{\hat{A}}(\underline{x}) = \sqrt{\frac{2\pi}{V\omega_k}}\sum_{\underline{k}}\sum_{\lambda=1}^{2}\underline{\varepsilon}_{\underline{k},\lambda}\left(\hat{a}_{\underline{k},\lambda}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{k}\cdot\underline{x}} + \hat{a}^+_{\underline{k},\lambda}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\underline{k}\cdot\underline{x}}\right) \tag{1.4.150}$$

故由式 (1.4.146) 和式 (1.4.149) 知

$$\hat{H}_{\text{e-light}} = \int \mathrm{d}^3x \hat{\psi}^+(\underline{x}) \left(\frac{\mathrm{i}e}{2m} \underline{\hat{A}} \cdot \boldsymbol{\nabla} \right) \hat{\psi}(\underline{x}) \tag{1.4.151}$$

其中, 我们利用了库仑规范条件 $\boldsymbol{\nabla} \cdot \underline{A} = 0$, 并且略去了含 $\underline{\hat{A}}^2$ 的非线性部分, 这是因为通常情形 $\underline{A}$ 很小, 但是在某些情形, 特别是在非线性光学中, 这项是不能忽略的. 式 (1.4.151) 中的电子场算符的展开式是

$$\hat{\psi}(\underline{x}) = \sum_{\underline{p}} \hat{c}_{\underline{p}} \psi_{\underline{p}}(\underline{x}) \tag{1.4.152}$$

$$\hat{\psi}^+(\underline{x}) = \sum_{\underline{p}} \hat{c}^+_{\underline{p}} \psi^*_{\underline{p}}(\underline{x}) \tag{1.4.153}$$

其中, $\psi_{\underline{p}}(\underline{x})$ 是满足薛定谔方程

$$\left[-\frac{1}{2m} \boldsymbol{\nabla}^2 + V(\underline{x}) \right] \psi_{\underline{p}}(\underline{x}) = \varepsilon_{\underline{p}} \psi_{\underline{p}}(\underline{x}) \tag{1.4.154}$$

的解. 进一步让电子场算符和光子场算符之间满足对易关系, 则可得知

$$[\hat{c}_{\underline{p}}, \hat{a}_{\underline{k}\lambda}] = [\hat{c}^+_{\underline{p}}, \hat{a}_{\underline{k}\lambda}] = [\hat{c}_{\underline{p}}, \hat{a}^+_{\underline{k}\lambda}] = [\hat{c}^+_{\underline{p}}, \hat{a}^+_{\underline{k}\lambda}] = 0 \tag{1.4.155}$$

现在把式 (1.4.150) 及电子场算符的展开式代入式 (1.4.151) 中得

$$\hat{H}_{\text{e-light}} = \sum_{\underline{p}\underline{p}'\underline{k}\lambda} \left(g_{\underline{p}\underline{p}'\underline{k}\lambda} \hat{c}^+_{\underline{p}} \hat{c}_{\underline{p}'} \hat{a}_{\underline{k}\lambda} + g'_{\underline{p}\underline{p}'\underline{k}\lambda} \hat{c}^+_{\underline{p}} \hat{c}_{\underline{p}'} \hat{a}^+_{\underline{k}\lambda} \right) \tag{1.4.156}$$

式中, 耦合常数 $g_{\underline{p}\underline{p}'\underline{k}\lambda}$ 为

$$g_{\underline{p}\underline{p}'\underline{k}\lambda} = \zeta_{\underline{k}} \int \mathrm{d}^3x \psi^*_{\underline{p}}(\underline{x}) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{k}\cdot\underline{x}} \underline{\varepsilon}_{\underline{k}\lambda} \cdot \boldsymbol{\nabla} \psi_{\underline{p}'}(x) \tag{1.4.157}$$

其中, $\zeta_{\underline{k}} \equiv \mathrm{i}\sqrt{2\pi/(V\omega_{\underline{k}})}e/m$; $g'_{\underline{p}\underline{p}'\underline{k}\lambda} = g_{\underline{p}\underline{p}'(-\underline{k})\lambda}$. 注意, $\hat{H}_{\text{e-light}}$ 的结构与电子–声子相互作用的作用颇为相似, 不同的是: ① 耦合常数的意义不同; ② 电声相互作用情形下电子是在周期势场中运动而现在 $V(\underline{x})$ 可以任意.

(三) 极化激元

人们将光子与激子、声子、磁激元等的耦合模量子统称为极化激元. 它的存在已被拉曼光谱实验所证实. 作为例子, 这里仅考虑激子与光子的耦合, 并且激子只是弗仑克尔激子. 但这里的思想和方法也能够较为容易地推广到万尼尔激子情形.

为了不涉及过多的繁杂指标并易于了解极化激元的形成, 作如下一些简化假设:

(1) 光波的波矢 $\underline{k}$ 沿 x 轴方向, 且极化仅沿 y 轴方向;

(2) 导带中的原子函数是平行于或者垂直于 x 轴的 p-函数, 而且不同格位上的原子函数不发生交叠;

(3) 属于价带的基态波函数有 S 对称性;

(4) 原子函数满足的选择定则是仅在基态 S 和激发态 P 之间发生跃迁;

(5) 光的波矢的模远小于格间距的倒数.

根据简化假设 (1), 光的极化仅一个方向, 因而可以略去光子的产生和消灭算符 $\hat{a}^{+}_{\underline{k}\lambda}$ 和 $\hat{a}_{\underline{k}\lambda}$ 中的指标 λ. 从而可以将自由光子的哈密顿写成 (略去无关紧要的常数项后)

$$\hat{H}_{\text{light}} = \sum_{\underline{k}} \omega_{\underline{k}} \hat{a}^{+}_{\underline{k}} \hat{a}_{\underline{k}} \tag{1.4.158}$$

为了给出在简化假设下的光子–电子相互作用哈密顿的形式, 首先将耦合常数式 (1.4.157) 中的 ψ 取成如下形式的格点 $\underline{l}$ 上的局域函数 $w_{\kappa}(\underline{x}-\underline{l})$, 它可以是万尼尔函数, 也可以更简单地取成上面简化假设中所说的原子函数. 复合指标 κ 可以是 V(指价带 S 波) 或 C,1 或 C,2 或 C,3(指导带 P 波). 这样按照式 (1.4.157), 耦合常数可以写成

$$g_{\underline{l}\kappa,\underline{l}'\kappa',\underline{k}} = \zeta_{\underline{k}} \int \mathrm{d}^3 x w^{*}_{\kappa}(\underline{x}-\underline{l}) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{k}\cdot\underline{x}} \underline{\varepsilon}_{\underline{k}} \cdot (\mathrm{i}\boldsymbol{\nabla}) w_{\kappa'}(\underline{x}-\underline{l}') \tag{1.4.159}$$

但是由于简化假设 (2) 可知, 在上式中应取 $\underline{l}'=\underline{l}$, 因仅在这种情形下的矩阵元才不为零. 又根据简化假设 (5) 可知, 在一个晶格范围内, 可以将 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{k}\cdot\underline{x}}$ 用 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{k}\cdot\underline{l}}$ 代替并可提取到积分号外. 最后又考虑到简化假设 (4), 所以我们仅需要考虑如下矩阵元:

$$g \sim \mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{k}\cdot\underline{l}} \underline{\varepsilon}_{\underline{k}} \cdot \underline{p}_{\mathrm{V,C}} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{k}\cdot\underline{l}} p_y \tag{1.4.160}$$

其中

$$\underline{p}_{\mathrm{V,C}} = \int \mathrm{d}^3 x w^{*}_{\mathrm{V}}(\underline{x}-\underline{l})(\mathrm{i}\boldsymbol{\nabla}) w_{\mathrm{C}}(\underline{x}-\underline{l}) \tag{1.4.161}$$

由式 (1.4.160) 可见, 横向光场将只能与横向弗仑克尔激子发生相互作用. 现在我们可以将耦合常数写成如下形式:

$$g = \frac{1}{\sqrt{N}} D \mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{k}\cdot\underline{l}} \tag{1.4.162}$$

其中, 为简单起见, 取常数 D 为与 $\underline{k}$ 无关的实数. 类似地, 有

$$g' = \frac{1}{\sqrt{N}} D \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\underline{k}\cdot\underline{l}} \tag{1.4.163}$$

现在可以把光子–电子相互作用哈密顿 $\hat{H}_{\text{e-light}}$(式 (1.4.156)) 写成如下吸收和发射两部分：

$$\hat{H}_{\text{e-light}} = \hat{H}^{(\text{ab})}_{\text{e-light}} + \hat{H}^{(\text{em})}_{\text{e-light}} \tag{1.4.164}$$

其中

$$\hat{H}^{(\text{ab})}_{\text{e-light}} = \sum_{\underline{k}} D(\hat{a}_{\underline{k}}\hat{B}^{+}_{\underline{k}} + \hat{a}_{\underline{k}}\hat{B}_{-\underline{k}}) \tag{1.4.165}$$

$$\hat{H}^{(\text{em})}_{\text{e-light}} = \sum_{\underline{k}} D(\hat{a}^{+}_{\underline{k}}\hat{B}_{\underline{k}} + \hat{a}^{+}_{\underline{k}}\hat{B}^{+}_{-\underline{k}}) \tag{1.4.166}$$

式中

$$\hat{B}^{+}_{\underline{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\underline{l}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{k}\cdot\underline{l}}\hat{c}^{+}_{\mathrm{C},y,\underline{l}}\hat{d}^{+}_{\underline{l}} \tag{1.4.167}$$

$$\hat{B}_{\underline{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\underline{l}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\underline{k}\cdot\underline{l}}\hat{d}_{\underline{l}}\hat{c}_{\mathrm{C},y,\underline{l}} \tag{1.4.168}$$

分别是波矢为 $\underline{k}$ 的弗仑克尔激子的产生算符和消灭算符, $\hat{d}_{\underline{l}} \equiv \hat{c}^{+}_{\mathrm{V},\underline{l}}$ 是价带中在格点 $\underline{l}$ 处的空穴消灭算符. 又因电子的哈密顿 (它可以包含电子间的库仑相互作用)$\hat{H}_{\mathrm{e}}$ 借助于弗仑克尔激子算符表达成

$$\hat{H}_{\mathrm{e}} = \sum_{\underline{k}} E_{\underline{k}}\hat{B}^{+}_{\underline{k}}\hat{B}_{\underline{k}} \tag{1.4.169}$$

故光子–电子相互作用体系的总哈密顿为

$$\begin{aligned}\hat{H} = \hat{H}_{\mathrm{e}} + \hat{H}_{\text{light}} + \hat{H}_{\text{e-light}} &= \sum_{\underline{k}}\left(E_{\underline{k}}\hat{B}^{+}_{\underline{k}}\hat{B}_{\underline{k}} + \omega_{\underline{k}}\hat{a}^{+}_{\underline{k}}\hat{a}_{\underline{k}}\right)\\ &+ \sum_{\underline{k}} D\left(\hat{a}_{\underline{k}}\hat{B}^{+}_{\underline{k}} + \hat{a}_{\underline{k}}\hat{B}_{-\underline{k}} + \hat{a}^{+}_{\underline{k}}\hat{B}_{\underline{k}} + \hat{a}^{+}_{\underline{k}}\hat{B}^{+}_{-\underline{k}}\right)\end{aligned} \tag{1.4.170}$$

进一步作近似, 因为算符 $\hat{a}_{\underline{k}}\hat{B}_{-\underline{k}}$ 对应于光子和弗仑克尔激子同时消灭的过程, 而 $\hat{a}^{+}_{\underline{k}}\hat{B}^{+}_{-\underline{k}}$ 对应于光子和弗仑克尔激子同时产生的过程. 显然它们不满足能量守恒的要求, 所以只要不考虑它们在高阶近似下的虚过程中的贡献, 就可以略去这两项. 从而

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \sum_{\underline{k}}\left(E_{\underline{k}}\hat{B}^{+}_{\underline{k}}\hat{B}_{\underline{k}} + \omega_{\underline{k}}\hat{a}^{+}_{\underline{k}}\hat{a}_{\underline{k}} + D\hat{a}_{\underline{k}}\hat{B}^{+}_{\underline{k}} + D\hat{a}^{+}_{\underline{k}}\hat{B}_{\underline{k}}\right)\\ &= (\hat{B}^{+}_{\underline{k}}, \hat{a}^{+}_{\underline{k}})\begin{pmatrix} E_{\underline{k}} & D \\ D & \omega_{\underline{k}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\hat{B}_{\underline{k}} \\ \hat{a}_{\underline{k}}\end{pmatrix}\end{aligned} \tag{1.4.171}$$

引入两个新算符 $\hat{P}_{1\underline{k}}$ 和 $\hat{P}_{2\underline{k}}$, 使得

$$\begin{pmatrix} \hat{B}_{\underline{k}} \\ \hat{a}_{\underline{k}} \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} \hat{P}_{1\underline{k}} \\ \hat{P}_{2\underline{k}} \end{pmatrix} \tag{1.4.172}$$

其中, U 是变换矩阵：

$$U = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} \\ u_{21} & u_{22} \end{pmatrix} \tag{1.4.173}$$

将式 (1.4.172) 代入式 (1.4.171) 中得

$$\hat{H} = (\hat{P}^+_{1\underline{k}}, \hat{P}^+_{2\underline{k}}) U^{-1} \begin{pmatrix} E_{\underline{k}} & D \\ D & \omega_{\underline{k}} \end{pmatrix} U \begin{pmatrix} \hat{P}_{1\underline{k}} \\ \hat{P}_{2\underline{k}} \end{pmatrix} \tag{1.4.174}$$

现在执行矩阵对角化, 使得

$$U^{-1} \begin{pmatrix} E_{\underline{k}} & D \\ D & \omega_{\underline{k}} \end{pmatrix} U = \begin{pmatrix} \Omega_{1\underline{k}} & 0 \\ 0 & \Omega_{2\underline{k}} \end{pmatrix}$$

由此得到方程组

$$\begin{cases} (E_{\underline{k}} - \Omega_{i\underline{k}}) u_{1i} + D u_{2i} = 0 \\ D u_{1i} + (\omega_{\underline{k}} - \Omega_{i\underline{k}}) u_{2i} = 0 \end{cases}$$

其中, $i = 1, 2$. 由其系数行列式为零, 即

$$\begin{vmatrix} E_{\underline{k}} - \Omega_{i\underline{k}} & D \\ D & \omega_{\underline{k}} - \Omega_{i\underline{k}} \end{vmatrix} = 0$$

可得

$$\Omega_{1\underline{k}} = \frac{1}{2} \left[\omega_{\underline{k}} + E_{\underline{k}} + \sqrt{(\omega_{\underline{k}} - E_{\underline{k}})^2 + 4D^2} \right] \tag{1.4.175}$$

$$\Omega_{2\underline{k}} = \frac{1}{2} \left[\omega_{\underline{k}} + E_{\underline{k}} - \sqrt{(\omega_{\underline{k}} - E_{\underline{k}})^2 + 4D^2} \right] \tag{1.4.176}$$

这样, 体系的哈密顿就可以写成如下形式：

$$\hat{H} = \sum_{\underline{k}} \left(\Omega_{1\underline{k}} \hat{P}^+_{1\underline{k}} \hat{P}_{1\underline{k}} + \Omega_{2\underline{k}} \hat{P}^+_{2\underline{k}} \hat{P}_{2\underline{k}} \right) \tag{1.4.177}$$

特别是我们可以证明 U 能够选取成为幺正矩阵, 从而使得算符 $\hat{P}$ 和激子、光子算符一样也满足玻色子算符的正则对易关系. $\hat{P}$ 和 $\hat{P}^+$ 表示的是极化激元的消灭和产生算符, 而式 (1.4.177) 正反映了这些具有玻色子性质的准粒子 —— 极化激元的总能量.

六、磁激元

磁激元是自旋晶格系统中的准粒子 (元激发). 该系统的基态是磁性离子自旋排列的有序状态. 最常见的磁有序态有铁磁序、亚铁磁序和反铁磁序等. 由于系统中交换耦合的存在, 任何相对于基态所产生的局域自旋偏离一般不会保持在原来的区域, 而会像波一样传播, 这些低激发称为**自旋波**. 自旋波的量子就是所谓的磁激元 (或磁振子). 也就是当自旋波场被量子化后, 我们就可以借助于处于特定模式中的一定数目的磁激元来表述激发态. 值得注意的是, 将磁激元作为无相互作用准粒子的概念只在非常低的温度下成立, 即要远低于长程磁序破坏时的特征温度.

描述有局域磁矩的磁性体系的一个典型模型是**海森伯模型**, 其哈密顿为

$$\hat{H} = -J\sum_{\langle ij\rangle}\underline{\hat{S}}_i\cdot\underline{\hat{S}}_j \tag{1.4.178}$$

其中, $\underline{\hat{S}}_i = \left(\hat{S}_i^x, \hat{S}_i^y, \hat{S}_i^z\right)$ 是格位 i 上的自旋矢量算符. 当 $J > 0$ 时, 该哈密顿可以描述铁磁体, $J < 0$ 时可描述反铁磁体. 式 (1.4.61) 表明它来自于电子之间的交换作用. 由于我们此时的目的只是揭示固体中有所谓磁激元这一类准粒子的存在, 所以我们仅就铁磁体情形来讨论海森伯模型的二次量子化表述以及铁磁体中的自旋波和磁激元, 而其中的思想和方法不难推广到其他情形.

显然所有格位上的自旋都平行且指向都沿着量子化轴 (设为 z 轴) 方向的状态是铁磁体的一种基态, 不失一般性, 可以设为

$$|\varPhi_g\rangle = |\uparrow\uparrow\cdots\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2\cdots|\uparrow\rangle_i\cdots|\uparrow\rangle_N$$

首先引入自旋升降算符$\hat{S}_i^{\pm}$, 其定义是

$$\hat{S}_i^{\pm} \equiv \hat{S}_i^x \pm \mathrm{i}\hat{S}_i^y \tag{1.4.179}$$

注意到在以自旋角动量的平方 $\hat{S}_i^2$ 和自旋 z 分量 $\hat{S}_i^z$ 的共同本征矢量为基底的 “标准基底”$\{|S, m_i\rangle\}$ 中:

$$\hat{S}_i^{\pm}|S, m_i\rangle = \sqrt{S(S+1) - m_i(m_i \pm 1)}|S, m_i \pm 1\rangle \tag{1.4.180}$$

其中, S 是自旋角量子数; m_i 是自旋磁量子数. 在标准基底中, 还满足

$$\hat{S}_i^2|S, m_i\rangle = S(S+1)|S, m_i\rangle \tag{1.4.181}$$

$$\hat{S}_i^z|S, m_i\rangle = m_i|S, m_i\rangle \tag{1.4.182}$$

当 $\hat{S}_i^-$ 作用到 $|\varPhi_g\rangle$ 上时, 会使格点 i 上的自旋发生偏离 (若 $S = 1/2$, 则发生自旋倒向), 即

$$\hat{S}_i^-|\varPhi_g\rangle \sim |\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2\cdots|\uparrow\rangle_{i-1}|\nearrow\rangle_i|\uparrow\rangle_{i+1}\cdots|\uparrow\rangle_N$$

反过来, 若 $\hat{S}_i^+$ 作用到上述自旋偏离态上, 则会消除这种自旋偏离.

应该注意到算符 $\hat{S}_i^+(\hat{S}_i^-)$ 分别消灭 (产生) 在格位 i 上的自旋偏离与谐振子的消灭产生算符之间的某种相似性. 并且算符乘积 $\hat{S}_i^-\hat{S}_j^+$ 可表示自旋偏离在格位 j 和格位 i 之间的传播, 在一个有效磁场中, 自旋的能级构成一个等距序列, 这也与谐振子的能级序列类似等. 一个区别是在谐振子情形, 序列是无限的, 而自旋的能级序列是有限的 ($2S+1$ 重). 但这种区别不是重要的, 事实上在自旋情形, 也可以处理成无限维矩阵, 只要将大于 $2S+1$ 的自旋偏离的矩阵元视为零即可. 另一个重大区别是谐振子的消灭产生算符满足玻色子算符的标准对易关系, 而自旋升降算符的对易关系却是

$$[\hat{S}_i^+, \hat{S}_j^-] = 2\hat{S}_i^z\delta_{ij} \tag{1.4.183}$$

尽管如此, 由于上述相似性, 我们可以建立起自旋升降算符与消灭产生算符之间的某种联系. 为此引入

$$n_i = S - m_i \quad (m_i = 0, \pm 1, \cdots, \pm S) \tag{1.4.184}$$

它代表自旋在量子化轴方向上投影的偏离量, 称为**自旋偏离量子数**. 若用 n_i 替代自旋磁量子数 m_i 来标记自旋态 (并略去标记 S), 则由式 (1.4.180) 可得

$$\hat{S}_i^+|n_i\rangle = \sqrt{2S}\sqrt{1-\frac{n_i-1}{2S}}\sqrt{n_i}|n_i-1\rangle \tag{1.4.185}$$

$$\hat{S}_i^-|n_i\rangle = \sqrt{2S}\sqrt{n_i+1}\sqrt{1-\frac{n_i}{2S}}|n_i+1\rangle \tag{1.4.186}$$

此时若将它们与通常的粒子数算符以及粒子的产生和消灭算符的性质作比较, 不难发现, 可以令自旋偏离量子数 n_i 对应的数算符为

$$\hat{n}_i = \hat{a}_i^+\hat{a}_i \tag{1.4.187}$$

且有

$$\hat{S}_i^+ = \sqrt{2S}\sqrt{1-\frac{\hat{a}_i^+\hat{a}_i}{2S}}\hat{a}_i \tag{1.4.188}$$

$$\hat{S}_i^- = \sqrt{2S}\hat{a}_i^+\sqrt{1-\frac{\hat{a}_i^+\hat{a}_i}{2S}} \tag{1.4.189}$$

$$\hat{S}_i^z = S - \hat{a}_i^+\hat{a}_i \tag{1.4.190}$$

式 (1.4.188)$\sim$ 式 (1.4.190) 称为 **Holstein-Primakoff(HP) 变换**. 其中, $\hat{a}_i^+$ 和 $\hat{a}_i$ 可以解释为自旋偏离的产生和消灭算符, 它们满足标准的玻色子对易关系. 事实上将

式 (1.4.188)~ 式 (1.4.190) 代入式 (1.4.183) 可得

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^+] = \delta_{ij} \tag{1.4.191}$$

而所有其他对易子都为零. 出现在式 (1.4.188) 中的 **HP 根式**:

$$\hat{T}_i \equiv \sqrt{1 - \frac{\hat{a}_i^+ \hat{a}_i}{2S}} \tag{1.4.192}$$

一般会使得有关理论计算变得复杂, 但是对于低激发态情形, 由于每个自旋的平均偏离很小, 则 $n_i/(2S) \ll 1$, 此时常可利用泰勒展开

$$\hat{T}_i = 1 - \frac{1}{2}\left(\frac{n_i}{2S}\right) + \frac{1}{8}\left(\frac{n_i}{2S}\right)^2 + \cdots \tag{1.4.193}$$

来方便地加以处理. 借助于自旋升降算符首先将海森伯哈密顿式 (1.4.178) 写成

$$\hat{H} = -J\sum_{\langle ij\rangle}\left[\hat{S}_i^z \hat{S}_j^z + \frac{1}{2}\left(\hat{S}_i^+ \hat{S}_j^- + \hat{S}_i^- \hat{S}_j^+\right)\right] \tag{1.4.194}$$

然后, 将 HP 变换式代入上式中, 就可得出海森伯哈密顿的如下二次量子化形式:

$$\hat{H} = -JNZS^2 - J\sum_{\langle ij\rangle}\left(2S\hat{a}_i^+ \hat{T}_i \hat{T}_j \hat{a}_j - S\hat{a}_i^+ \hat{a}_i - S\hat{a}_j^+ \hat{a}_j + \hat{a}_i^+ \hat{a}_i \hat{a}_j^+ \hat{a}_j\right) \tag{1.4.195}$$

其中, Z 是配位数.

下面我们仅考虑非常低的温度情形, 故 $n_i/(2S) \ll 1$, 并近似考虑 $\hat{T}_i \approx 1$, 同时略去式 (1.4.195) 中右端最后一项 (该项仅有小的贡献, 并且在某些情形它的贡献实际上是零). 这样

$$\hat{H} = -JNZS^2 + 2ZJS\sum_i \hat{a}_i^+ \hat{a}_i - 2JS\sum_{\langle ij\rangle} \hat{a}_i^+ \hat{a}_j \tag{1.4.196}$$

为了对角化, 我们进行下列自旋波变换:

$$\hat{a}_i = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\underline{k}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\underline{k}\cdot\underline{R}_i} \hat{a}_{\underline{k}} \tag{1.4.197}$$

$$\hat{a}_i^+ = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\underline{k}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{k}\cdot\underline{R}_i} \hat{a}_{\underline{k}}^+ \tag{1.4.198}$$

其中, 波矢 $\underline{k}$ 的可能值可以通过施加周期性边界条件来确定. 这里我们限制波矢在第一布里渊区, 从而有

$$\sum_i \mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{k}\cdot\underline{R}_i} = N\delta_{\underline{k}0}$$

将式 (1.4.197) 和式 (1.4.198) 代入式 (1.4.191), 可知 $\hat{a}_{\underline{k}}$, $\hat{a}_{\underline{k}}^{+}$ 仍满足玻色对易关系:

$$[\hat{a}_{\underline{k}}, \hat{a}_{\underline{k}'}] = [\hat{a}_{\underline{k}}^{+}, \hat{a}_{\underline{k}'}^{+}] = 0, \quad [\hat{a}_{\underline{k}}, \hat{a}_{\underline{k}'}^{+}] = \delta_{\underline{k}\underline{k}'} \tag{1.4.199}$$

借助于自旋波算符, 哈密顿算符成为

$$\hat{H} = E_0 + \sum_{\underline{k}} \hbar\omega_{\underline{k}} \left(\hat{a}_{\underline{k}}^{+} \hat{a}_{\underline{k}} + \frac{1}{2} \right) \tag{1.4.200}$$

其中, $E_0 = -JNZS^2$ 为基态能; $\omega_{\underline{k}}$ 为自旋波频率, 且

$$\hbar\omega_{\underline{k}} = 2ZJS(1 - \gamma_{\underline{k}}) \tag{1.4.201}$$

$$\gamma_{\underline{k}} \equiv \frac{1}{Z} \sum_{\underline{\delta}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{k}\cdot\underline{\delta}} \tag{1.4.202}$$

式中, $\underline{\delta}$ 是最近邻格点间的位置矢量差.

这个哈密顿有着众所周知的谐振子形式. $\hat{a}_{\underline{k}}^{+}\hat{a}_{\underline{k}}$ 是数算符, $\hat{a}_{\underline{k}}^{+}$ 产生一个自旋波量子, 而 $\hat{a}_{\underline{k}}$ 消灭一个自旋波量子. 这些量子就称为磁激元, 它们满足玻色统计. 在占有数表象中, 磁激元哈密顿的本征态可以表示成

$$|\cdots n_{\underline{k}} \cdots\rangle = \prod_{\underline{k}} \frac{1}{\sqrt{n_{\underline{k}}!}} (\hat{a}_{\underline{k}}^{+})^{n_{\underline{k}}} |\cdots 0 \cdots\rangle \tag{1.4.203}$$

其中, $|\cdots 0 \cdots\rangle$ 为自旋波真空, 即 $\hat{a}_{\underline{k}}|\cdots n_{\underline{k}} \cdots\rangle = 0(\forall \underline{k})$.

有关磁激元的进一步讨论 (例如, 反铁磁亚铁磁中的自旋波以及磁激元之间的相互作用等) 可参见文献 (Sinha K P, Kumar N. Interactions in Magnetically Ordered Solids. Oxford: Oxford University Press, 1980).

附录 1A 泛函、泛函导数

1A.1 定义

⟨1⟩ 泛函$F[\varphi(x)]$ 定义了函数集 $\{\varphi(x)\}$ 到数集 (或到函数集) 的一个映射, 但不要将泛函简单说成函数的函数, 因为这容易误解为复合函数, 而复合函数仍然是一个函数. 这里的 x 不是通常意义下的自变量, 一般情形下, x 取某一个特定的值对于泛函可能没有意义, 故有时将泛函简记为 $F[\varphi]$.

可以将泛函 $F[\varphi(x)]$ 看成多元函数的极限情形. 例如, 可以将 $\varphi(x)$ 定义于其上的空间分成若干格子, 取 $\varphi(x)$ 在格子 i 中的平均值为独立变量 φ_i. 由此可定义多

元函数 $F(\varphi_1,\varphi_2,\cdots,\varphi_n)$, 当 $n\to\infty$, 且格子体积趋于零时, 分离变量成为连续的, φ_i 成为场量 $\varphi(x)$, 而多元函数 $F(\varphi_1,\varphi_2,\cdots,\varphi_n)$ 就成为函数 $\varphi(x)$ 的泛函 $F[\varphi(x)]$:

$$F[\varphi(x)]=\lim_{n\to\infty}F(\varphi_1,\varphi_2,\cdots,\varphi_n) \tag{1A.1.1}$$

$\langle 2\rangle$ (经典)**对易场 (玻色场)** $\varphi(x)$ 的泛函导数可以作为多元函数的偏导数的连续极限而引入. 对于多元函数 $F(\varphi_1,\varphi_2,\cdots,\varphi_n)$, 有

$$\begin{aligned}&F(\varphi_1+\mathrm{d}\varphi_1,\varphi_2+\mathrm{d}\varphi_2,\cdots,\varphi_n+\mathrm{d}\varphi_n)-F(\varphi_1,\varphi_2,\cdots,\varphi_n)\\=&\sum_i\frac{\partial F}{\partial\varphi_i}\mathrm{d}\varphi_i+0(\mathrm{d}\varphi^2)\equiv\mathrm{d}F+0(\mathrm{d}\varphi^2)\end{aligned}$$

即一阶偏导数决定了函数增量的线性主部. 其连续极限为

$$F[\varphi+\delta\varphi]-F[\varphi]=\int\mathrm{d}x\frac{\delta F[\varphi]}{\delta\varphi(x)}\delta\varphi(x)+0(\delta\varphi^2)\equiv\delta F+0(\mathrm{d}\varphi^2) \tag{1A.1.2}$$

即**一阶泛函导数** $F^{(1)}\equiv\dfrac{\delta F[\varphi]}{\delta\varphi(x)}$ 决定了泛函增量的线性主部. 物理学中 $F^{(1)}$ 通常是 φ 的函数, 又可能同时是 x 的函数. 式 (1A.1.2) 中的 $\int\mathrm{d}x$ 应理解为 $\int\mathrm{d}^d x$, 其中, 上标 d 表示 $\varphi(x)$ 定义于其上的空间的维数, 以后的公式也遵循同样的约定. 由于 $\delta\varphi(x)$ 选取的任意性, 不妨取

$$\delta\varphi(x)=\varepsilon\delta(x-y) \tag{1A.1.3}$$

其中, $\delta(x-y)$ 为狄拉克 δ 函数. 将式 (1A.1.3) 代入式 (1A.1.2) 得

$$\frac{\delta F[\varphi]}{\delta\varphi(y)}=\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{F[\varphi(x)+\varepsilon\delta(x-y)]-F[\varphi(x)]}{\varepsilon} \tag{1A.1.4}$$

实际计算时, 也可用上式作为泛函导数的定义. 类似地, 可仿照 d 阶偏导数来定义 m 阶泛函导数 $F^{(m)}[\varphi]$, 即 $\dfrac{\delta^m F[\varphi]}{\delta\varphi(x_1)\delta\varphi(x_2)\cdots\delta\varphi(x_m)}$.

运用式 (1A.1.2) 或式 (1A.1.4), 很易导出泛函导数的如下一些重要性质:

(1)
$$\frac{\delta\varphi(y)}{\delta\varphi(x)}=\delta(y-x) \tag{1A.1.5}$$

式中, 我们已将普通函数看成泛函的特例.

(2) 对于与 $\varphi(x)$ 无关的任意函数 $f(x),g(x)$, 有

$$\frac{\delta f(x)}{\delta\varphi(x)}=0 \tag{1A.1.6}$$

$$\frac{\delta}{\delta\varphi(x)}\{fF[\varphi]+gG[\varphi]\}=f\frac{\delta F[\varphi]}{\delta\varphi(x)}+g\frac{\delta G[\varphi]}{\delta\varphi(x)} \tag{1A.1.7}$$

(3)
$$\frac{\delta}{\delta\varphi(x)}\{F[\varphi]G[\varphi]\}=\frac{\delta F[\varphi]}{\delta\varphi(x)}G[\varphi]+F[\varphi]\frac{\delta G[\varphi]}{\delta\varphi(x)} \tag{1A.1.8}$$

(4) 对于复合泛函的泛函导数, 有

$$\frac{\delta}{\delta\varphi(x)}\{F[G[\varphi]]\}=\int \mathrm{d}y\frac{\delta F[G]}{\delta G[\varphi(y)]}\frac{\delta G[\varphi(y)]}{\delta\varphi(x)} \tag{1A.1.9}$$

证明　$F[G[\varphi+\delta\varphi]]=F[G[\varphi]+\delta G[\varphi]]$

$$=F[G[\varphi]]+\int \mathrm{d}y\frac{\delta F[G]}{\delta G[\varphi(y)]}\delta G[\varphi(y)]+0((\delta G[\varphi])^2)$$

$$=F[G[\varphi]]+\int \mathrm{d}y\frac{\delta F[G]}{\delta G[\varphi(y)]}\int \mathrm{d}x\frac{\delta G[\varphi(y)]}{\delta\varphi(x)}\delta\varphi(x)+0((\delta\varphi)^2)$$

再利用式 (1A.1.2) 就可导出式 (1A.1.9).

(5)
$$\frac{\delta}{\delta\varphi(y)}\frac{\mathrm{d}\varphi(x)}{\mathrm{d}x}=\frac{\partial}{\partial x}(x-y) \tag{1A.1.10}$$

$$\frac{\delta}{\delta\varphi(y)}\int \mathrm{d}x\varphi(x)=\int \mathrm{d}x\delta(x-y)=1 \tag{1A.1.11}$$

(6)
$$F[\varphi(x)+T(x)]=\mathrm{e}^{\int \mathrm{d}xT(x)\frac{\delta}{\delta\varphi(x)}}F[\varphi] \tag{1A.1.12}$$

证明　对于一元函数, 有

$$F(x+T)=\mathrm{e}^{T\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}}F(x)$$

对于多元函数, 有

$$F(\varphi_1+T_1,\varphi_2+T_2,\cdots,\varphi_n+T_n)=\mathrm{e}^{\sum\limits_{i=1}^{n}T_i\frac{\partial}{\partial\varphi_i}}F(\varphi_1,\varphi_2,\cdots,\varphi_n)$$

对上式取 $n\to\infty$ 的极限, 就过渡到式 (1A.1.12).

还可以将类似的方法应用于多元解析函数的麦克劳林级数:

$$F(\varphi_1,\varphi_2,\cdots,\varphi_n)=F(0,0,\cdots,0)+\sum_i\left(\frac{\partial F}{\partial\varphi_i}\right)_{\varphi_i=0}\varphi_i+\frac{1}{2!}\sum_{i,j}\left(\frac{\partial^2F}{\partial\varphi_i\partial\varphi_j}\right)_{\varphi_i=0}+\cdots \tag{1A.1.13}$$

作如下几种 “代换” 来得到上式取 $n\to\infty$ 的极限: 让离散指标 i 成为连续的, 变量 φ_i 成为场量 $\varphi(x)$, 将离散指标的求和 $\sum\limits_i$ 换成积分 $\int \mathrm{d}x_i$ (这里我们暂且回避积分测度问题). 这样, 我们可得对应于式 (1A.1.13) 的**解析泛函** $F[\varphi(x)]$ **的泛函展开:**

$$F[\varphi(x)]=\sum_{m=0}^{\infty}\frac{1}{m!}\int \mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\cdots\mathrm{d}x_m\left(\frac{\delta^m F[\varphi(x)]}{\delta\varphi(x_1)\delta\varphi(x_2)\cdots\delta\varphi(x_m)}\right)_{\varphi=0}\varphi(x_1)\varphi(x_2)\cdots\varphi(x_m) \tag{1A.1.14}$$

一般情形下的泛函展开技术以后再介绍.

前面的基本思想可用来定义**多元泛函** $F[\varphi,\psi,\cdots]$ 以及多元泛函的**偏泛函导数**, 例如:

$$\delta F[\varphi,\psi]=\int \mathrm{d}x\left[\frac{\delta F}{\delta\varphi(x)}\delta\varphi(x)+\frac{\delta F}{\delta\psi(x)}\delta\psi(x)\right] \tag{1A.1.15}$$

【练习】

$$\frac{\delta}{\delta\varphi(y)}\varphi^n(x)=n\varphi^{n-1}(x)\delta(x-y)$$

$$\frac{\delta}{\delta\varphi(y)}\left[\frac{\mathrm{d}\varphi(x)}{\mathrm{d}x}\right]^n=n\left[\frac{\mathrm{d}\varphi(x)}{\mathrm{d}x}\right]^{n-1}\frac{\partial}{\partial x}\delta(x-y)$$

$$\frac{\delta}{\delta\varphi(y)}\mathrm{e}^{\int\mathrm{d}x\varphi(x)\psi(x)}=\psi(y)\mathrm{e}^{\int\mathrm{d}x\varphi(x)\psi(x)}$$

⟨3⟩ 在讨论 (经典) 反对易场情形之前, 我们可以先考虑如下的**有限维 Grassmann 代数** A, 它由一组 (n 个) 反对易的生成元 $\theta_1,\theta_2,\cdots,\theta_n$ 所生成:

$$[\theta_i,\theta_j]_+\equiv\{\theta_i,\theta_j\}=0\quad(\forall i,j) \tag{1A.1.16}$$

显然, 由于每个生成元自身的幂为 0:

$$\theta_i^2=0\quad(i=1,2,\cdots,n) \tag{1A.1.17}$$

这些生成元可组成如下的基:

$$1,\theta_i,\theta_{i_1}\theta_{i_2}(i_1<i_2),\cdots,\theta_{i_1}\cdots\theta_{i_n}\quad(i_1<i_2<\cdots<i_n) \tag{1A.1.18}$$

在实数域 (或复数域) 上的 Grassmann 代数 A 中的任何一个元素都可表示为这些基的有实系数 (或复系数) 的线性组合, 即代数 A 形成了 2^n 维矢量空间.

在有偶数 $n=2p$ 个生成元的 Grassmann 代数中, 还可以定义一种**共轭对应关系**"—": 选一组 p 个 θ_i 生成元 θ_i, 然后对每个生成元 θ_i 联系一个与之共轭的生成元 $\overline{\theta_i}$, 使得

$$\overline{(\theta_i)}=\overline{\theta_i} \tag{1A.1.19}$$

$$\overline{(\overline{\theta_i})}=\theta_i \tag{1A.1.20}$$

$$\overline{(\lambda\theta_i)}=\lambda^*\overline{\theta_i}\quad(\lambda^*\text{是复数}\lambda\text{的复共轭}) \tag{1A.1.21}$$

$$\overline{(\theta_{i_1}\theta_{i_2}\cdots\theta_{i_r})}=\overline{\theta_{i_r}}\cdots\overline{\theta_{i_2}}\,\overline{\theta_{i_1}} \tag{1A.1.22}$$

引入如下一种**“反射”运算** P：对任何 $r \leqslant n$, 定义

$$P(\theta_{i_1}\theta_{i_2}\cdots\theta_{i_r}) = (-1)^r\theta_{i_1}\theta_{i_2}\cdots\theta_{i_r} \tag{1A.1.23}$$

当 r 为偶数时, 称 $\theta_{i_1}\theta_{i_2}\cdots\theta_{i_r}$ 有**偶 (Grassmann) 宇称**; 当 r 为奇数时, 则称有**奇宇称**. 但是代数 A 中的任何元素在线性算符 P 下不一定都具有确定的宇称. 我们把任何经由偶宇称的基的线性组合得到的元素称为**偶元**. 显然偶元有偶宇称, 并且它与任何元素都对易. 由有奇宇称的基的线性组合得到的元素称为**奇元**. 奇元与奇元之间是反对易的.

代数 A 中所有偶元和奇元分别组成 P 的两个本征子空间 $A^{\pm}$：

$$P(A^{\pm}) = \pm A^{\pm} \tag{1A.1.24}$$

其中, 偶元空间 A^+ 本身形成了一个对易代数.

我们可以在 A 中定义两种求导运算.

(1) **左导数** $\dfrac{\overrightarrow{\partial}}{\partial\theta_j}$：它是从代数 A 到自身的线性映射, 满足法则

$$\frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial\theta_j}(\theta_{i_1}\theta_{i_2}\cdots\theta_{i_r}) \equiv \delta_{ji_1}\theta_{i_2}\cdots\theta_{i_r} - \theta_{i_1}\delta_{ji_2}\theta_{i_3}\cdots\theta_{i_r} + \cdots + (-1)^{r-1}\theta_{i_1}\cdots\theta_{i_{r-1}}\delta_{ji_r} \tag{1A.1.25}$$

上式右端中任何一个含 δ_{ji_p} 的项, 系数为 $(-1)^{p-1}$, 而 $p-1$ 正是将因子 θ_{i_p} 移至最左端时所需的对换次数.

由式 (1A.1.25) 知

$$\frac{\overrightarrow{\partial}\,\theta_j}{\partial\theta_i} = \delta_{ij} \tag{1A.1.26}$$

进而可以证明

$$\left\{\frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial\theta_i}, \frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial\theta_j}\right\} = 0 \tag{1A.1.27}$$

$$\left\{\frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial\theta_i}, \theta_j\right\} = \delta_{ij} \tag{1A.1.28}$$

证明　式 (1A.1.27) 的正确性可利用式 (1A.1.25), 并将式 (1A.1.27) 中左端的反对易子作用于代数 A 中的任意基上恒为零来加以证明.

至于式 (1A.1.28), 由于对任意基 (如 θ_k) 有

$$\left\{\frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial\theta_i}, \theta_j\right\}\theta_k = \frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial\theta_i}(\theta_j\theta_k) + \theta_j\frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial\theta_i}\theta_k = \frac{\overrightarrow{\partial}\,\theta_j}{\partial\theta_i}\theta_k = \delta_{ij}\theta_k$$

故式 (1A.1.28) 成立.

上面定义的左导数实际上是一种反导数. 事实上, 任何一种作用于 A 上的**反导数算符** $\vec{D}$ 被要求满足两个条件. 一个是

$$\vec{D}(\lambda_1\Theta_1+\lambda_2\Theta_2)\equiv\lambda_1\vec{D}(\Theta_1)+\lambda_2\vec{D}(\Theta_2) \tag{1A.1.29}$$

其中, λ_1 和 λ_2 是任意复数; Θ_1 和 Θ_2 是代数 A 中的任意元素. 这个条件反映了线性性的要求. 另一个条件是

$$\vec{D}(\Theta_1\Theta_2)=\vec{D}(\Theta_1)\Theta_2+P(\Theta_1)\vec{D}(\Theta_2) \tag{1A.1.30}$$

我们知道, 通常的导数算符 d 满足所谓的莱布尼茨 (Leibnitz) 法则:

$$\mathrm{d}(\Theta_1\Theta_2)=\mathrm{d}(\Theta_1)\Theta_2+\Theta_1\mathrm{d}(\Theta_2) \tag{1A.1.31}$$

故我们把式 (1A.1.30) 中的法则称为**反莱布尼茨法则**.

若我们要 $\vec{D}$ 与 P 反对易:

$$\{\vec{D},P\}=0 \tag{1A.1.32}$$

则式 (1A.1.30) 的特殊形式是必要的. 而式 (1A.1.32) 意味着

$$\vec{D}A^{\pm}\subset A^{\mp} \tag{1A.1.33}$$

其中, $\subset$ 为包含于.

任何两个反导数的反对易子是普通导数, 即

$$\varDelta\equiv\{\vec{D}_1,\vec{D}_2\} \tag{1A.1.34}$$

满足莱布尼茨法则 (1A.1.31). 这只需要利用式 (1A.1.30)、式 (1A.1.32) 及

$$P^2=1 \tag{1A.1.35}$$

就可以证明.

A 中的任何反导数算符可分解成 $\vec{\partial}/\partial\theta_i$ 的有偶元系数的叠加.

对于反导数, 还有如下的**链法则**:

(a) 设 $f(\alpha)$ 是复 (实) 变量 α 的普通解析函数, 则对于代数 A 中的任何有确定宇称的元素 Θ, 有

$$\vec{D}(f(\Theta))=\vec{D}(\Theta)f'(\Theta) \tag{1A.1.36}$$

证明　若 $\Theta\in A^-$, 因 $\Theta^2=0$, 所以

$$f(\Theta)=f(0)+f'(0)\Theta \tag{1A.1.37}$$

由此知

$$\vec{D}(f(\Theta)) = f'(0)\vec{D}(\Theta) = \vec{D}(\Theta)f'(0) = \vec{D}(\Theta)f'(\Theta)$$

$\Theta \in A^+$, 则由 $f(\Theta) = f(0) + \sum\limits_{m=1} \frac{1}{m!} f^{(m)}(0)\Theta^m$ 得

$$\vec{D}(f(\Theta))=\sum_{m=1} \frac{1}{m!} f^{(m)}(0)\vec{D}(\Theta^m)=\vec{D}(\Theta)\sum_{m=1} \frac{1}{(m-1)!} f^{(m)}(0)\Theta^{m-1}=\vec{D}(\Theta)f'(\Theta)$$

(b) 若 $\tilde{\theta}_i = \sum\limits_j c_{ij}(x)\theta_j$, 其中, $c_{ij}(x)$ 是参数 x 的普通函数, 则

$$\frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial\theta_k} f(\tilde{\theta}) = \sum_i \frac{\overrightarrow{\partial}\tilde{\theta}_i}{\partial\theta_k} \frac{\overrightarrow{\partial} f(\tilde{\theta})}{\partial\tilde{\theta}_i} = \sum_i c_{ik}(x) \frac{\overrightarrow{\partial} f(\tilde{\theta})}{\partial\tilde{\theta}_i} \tag{1A.1.38}$$

其中, $f(\tilde{\theta}) \equiv f(\tilde{\theta}_1, \tilde{\theta}_2, \cdots, \tilde{\theta}_n)$.

在 $f(\tilde{\theta}) \equiv f(\tilde{\theta}_1, \tilde{\theta}_2)$ 的情形, 式 (1A.1.38) 很易被证明, 因为此时 $f(\tilde{\theta})$ 总可以写成如下形式：$f(\tilde{\theta}_1, \tilde{\theta}_2) = a_0 + a_1\tilde{\theta}_1 + a_2\tilde{\theta}_2 + a_3\tilde{\theta}_1\tilde{\theta}_2$. 简单的计算表明式 (1A.1.38) 左右两端均相等, 例如, 在 $k=1$ 时, 都为 $a_1c_{11} + a_2c_{21} + a_3(c_{11}c_{22} - c_{12}c_{21})\theta_2$, 而一般情形下的式 (1A.1.38) 可如下证明.

证明　因为 $f(\tilde{\theta})$ 总可以写成如下形式：

$$\begin{aligned} f(\tilde{\theta}_1, \tilde{\theta}_2, \cdots, \tilde{\theta}_n) =& f(0,0,\cdots,0) + \sum_i f_i\tilde{\theta}_i + \sum_{i_1<i_2} f_{i_1i_2}\tilde{\theta}_{i_1}\tilde{\theta}_{i_2} + \cdots \\ &+ \sum_{i_1<i_2<\cdots<i_r} f_{i_1i_2\cdots i_r}\tilde{\theta}_{i_1}\tilde{\theta}_{i_2}\cdots\tilde{\theta}_{i_r} + f_{12\cdots n}\tilde{\theta}_1\tilde{\theta}_2\cdots\tilde{\theta}_n \end{aligned} \tag{1A.1.39}$$

其中, $f\cdots$ 代表普通的数. 由于 Grassmann 变量的反对易性 (事实上 $\tilde{\theta}$ 是奇元), 我们可以进一步将系数 $f_{i_1i_2\cdots i_r}$ 选成对 $i_1, i_2, \cdots, i_r$ 是全反对称的. 若下面采用对重复指标自动求和的约定, 那么可将式 (1A.1.39) 改写成

$$f(\tilde{\theta}_1, \tilde{\theta}_2, \cdots, \tilde{\theta}_n) = f(0,0,\cdots,0) + \sum_{m=1}^{n} \frac{1}{m!} f_{[i_1i_2\cdots i_m]}\tilde{\theta}_{i_1}\tilde{\theta}_{i_2}\cdots\tilde{\theta}_{i_m} \tag{1A.1.40}$$

其中, 下标中的括号 $[\cdots]$ 表示括号内的指标是全反对称的. 将 $\tilde{\theta}_l = c_{lj}\theta_j$ 代入上式后, 可得

$$\frac{\vec{\partial} f(\tilde{\theta})}{\partial\theta_k} = \sum_{m=2}^{n} \frac{1}{(m-1)!} f_{[li_2i_3\cdots i_m]} c_{lk}c_{i_2j_2}c_{i_3j_3}\cdots c_{i_mj_m}\theta_{j_2}\theta_{j_3}\cdots\theta_{j_m} \tag{1A.1.41}$$

另外, 有

$$\frac{\vec{\partial} f(\tilde{\theta})}{\partial\tilde{\theta}_l} = \sum_{m=2}^{n} \frac{1}{(m-1)!} f_{[li_2i_3\cdots i_m]}\tilde{\theta}_{i_2}\tilde{\theta}_{i_3}\cdots\tilde{\theta}_{i_m} \tag{1A.1.42}$$

故 $\dfrac{\vec{\partial} f(\tilde{\theta})}{\partial \theta_k} = c_{lk} \dfrac{\vec{\partial} f(\tilde{\theta})}{\partial \tilde{\theta}_l}$, 此即式 (1A.1.38).

类似地, 当 $\tilde{\theta}_i = \sum\limits_j c_{ij}(x)\theta_j$ 时, 还有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} f(\tilde{\theta}) = \sum_i \frac{\mathrm{d}\tilde{\theta}_i}{\mathrm{d}x} \frac{\vec{\partial} f(\tilde{\theta})}{\partial \tilde{\theta}_i} = \sum_i \frac{\mathrm{d}c_{ij}(x)}{\mathrm{d}x} \theta_j \frac{\vec{\partial} f(\tilde{\theta})}{\partial \tilde{\theta}_i} \tag{1A.1.43}$$

(c) 若 $\sigma(\theta)$ 属于 A^-, $g(\theta)$ 属于 A^+, 则有

$$\frac{\vec{\partial}}{\partial \theta} f(\sigma, g) = \frac{\vec{\partial}\sigma}{\partial \theta} \frac{\partial f}{\partial \sigma} + \frac{\vec{\partial} g}{\partial \theta} \frac{\partial f}{\partial g} \tag{1A.1.44}$$

$\dfrac{\vec{\partial} g}{\partial \theta} \dfrac{\partial f}{\partial g}$ 的次序要紧, 因 $\dfrac{\vec{\partial} g}{\partial \theta} \in A^-$, 而 $\dfrac{\partial f}{\partial g}$ 中含有奇元 σ.

(2) 可类似地定义**右导数**$\dfrac{\overleftarrow{\partial}}{\partial \theta_i}$:

$$\begin{aligned} \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial \theta_j} (\theta_{i_1} \theta_{i_2} \cdots \theta_{i_r}) \equiv & (-1)^{r-1} \delta_{ji_1} \theta_{i_2} \cdots \theta_{i_r} \\ & + (-1)^{r-2} \theta_{i_1} \delta_{ji_2} \theta_{i_3} \cdots \theta_{i_r} + \cdots + \theta_{i_1} \theta_{i_2} \cdots \theta_{i_{r-1}} \delta_{ji_r} \end{aligned} \tag{1A.1.45}$$

其中, 含 δ_{ji_p} 的项的符号为 $(-1)^{r-p}$, 而 $r-p$ 正是将因子 θ_{i_p} 移至最右端所需要的对易次数.

相应地, 式 (1A.1.30) 应换成

$$\overleftarrow{D}(\varTheta_1 \varTheta_2) = \varTheta_1 \overleftarrow{D}(\varTheta_2) + \overleftarrow{D}(\varTheta_1) P(\varTheta_2) \tag{1A.1.46}$$

一般来说, 左导数不一定等于右导数, 但**左导数与右导数对易**.

当有限维 Grassmann 代数的指标集 $\{i\}$ 变成连续变量 x, θ_i 就变成**反对易经典场**$\theta(x)$. 式 (1A.1.16) 过渡为

$$[\theta(x), \theta(y)]_+ = 0 \tag{1A.1.47}$$

即有限维 Grassmann 代数过渡到**无限维 Grassmann 代数**. 可以类似地定义泛函 $F[\theta(x)]$ 的左 (右) 泛函导数, 求导时先把相应的 $\theta(x)$ 移到最左 (右) 边, 注意符号的改变, 再利用

$$\frac{\vec{\delta} \theta(x')}{\delta \theta(x)} = \frac{\overleftarrow{\delta} \theta(x')}{\delta \theta(x)} = \delta(x - x') \tag{1A.1.48}$$

就可以了.

例如:

$$\frac{\vec{\delta}}{\delta\overline{\theta}(y)}[\theta(x)\overline{\theta}(x')] = -\theta(x)\delta(x'-y) \tag{1A.1.49}$$

特别地, 应用时常使用如下 “形式” 的表达式:

$$\frac{\vec{\delta}}{\delta\theta(x)} = \int \mathrm{d}y \frac{\vec{\delta}F[\theta(y)]}{\delta\theta(x)} \frac{\delta}{\delta F[\theta(y)]} \tag{1A.1.50}$$

其中, $F[\theta(y)]$ 是 $\theta(y)$ 的某个泛函. **以后, 除特别说明外, $\dfrac{\delta}{\delta\theta}$ 都是指左导数**, 而不必用上标 $\rightarrow$ 号表明.

1A.2　作用量泛函、变分原理和对称变换群

$\langle 1\rangle$ 泛函的最重要的例子之一是作用量泛函. 事实上它是场论的基本理论工具. 一个动力学体系的所有物理信息原则上可以借助于作用量泛函来得到. 设作用量泛函为 S, 则①在施加一定边界条件后, 可以通过求 S 的驻值来获得场量所满足的运动方程, 即场方程; ② S 的对称性与守恒量相联系, 从而反映了物理体系的基本对称性.

作用量泛函S 的形式一般为

$$S \equiv \int_M \mathrm{d}x \mathcal{L}(\varphi_a(x), \partial_\mu\varphi_a(x)) \tag{1A.2.1}$$

其中, $\mathcal{L}$ 是拉氏密度, 它是场量和场量导数的函数; 角标 a 或者表示不同的场量或者表示同一场量的不同分量; $\mathrm{d}x \equiv \mathrm{d}t\mathrm{d}\underline{x}$. 在大多数情形, 可设 $\mathcal{L}$ 中场量导数只由一阶导数来构成. 另外还采用同一项中重复指标自动求和的规约.

$\langle 2\rangle$ **场论的作用量原理**指出, 场的实际运动是以如下方式发生的: 当场量作任意变化 $\delta\varphi_a(x)$, 但在的积分区域 M 的边界 ∂M 上不变, 即满足边界条件

$$\delta\varphi_a(x)|_{x\in\partial M} = 0 \tag{1A.2.2}$$

时, 作用量 S 的变分为零, 即

$$\delta S = 0 \tag{1A.2.3}$$

由上面的作用量原理可导出**场的拉氏运动方程**:

$$\begin{aligned}0 &= \delta\int_M \mathrm{d}x\mathcal{L}(\varphi_a(x), \partial_\mu\varphi_a(x)) = \int_M \mathrm{d}x\left[\delta\varphi_a(x)\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\varphi_a(x)} + \delta(\partial_\mu\varphi_a)\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\partial_\mu\varphi_a}\right]\\ &= \int_M \mathrm{d}x\delta\varphi_a(x)\left[\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\varphi_a(x)} - \partial_\mu\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\partial_\mu\varphi_a}\right] + \int_M \mathrm{d}x\partial_\mu\left(\delta\varphi_a\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\partial_\mu\varphi_a}\right)\end{aligned} \tag{1A.2.4}$$

这里我们利用了算符 δ (它与 x 无关) 与导数算符 ∂_μ 的对易性.

由高斯定理和边界条件可知, 式 (1A.2.4) 中最后一个全散度的积分为零：

$$\int_M \mathrm{d}x\partial_\mu \left(\delta\varphi_a \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\partial_\mu\varphi_a}\right) = \int_{\partial M} \mathrm{d}\sigma_\mu \delta\varphi_a \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\partial_\mu\varphi_a} = 0$$

由于 $\delta\varphi_a(x)$ 的任意性, 所以由式 (1A.2.4) 得知**场方程**为

$$\frac{\delta S}{\delta\varphi_a} = 0 \tag{1A.2.5}$$

其中

$$\frac{\delta S}{\delta\varphi_a} = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\varphi_a(x)} - \partial_\mu \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\partial_\mu\varphi_a(x)} \tag{1A.2.6}$$

场方程 (1A.2.5) 表示作用量泛函对场量的一阶泛函导数为零.

注意：当 $\mathcal{L}$ 含有场量的高阶导数时, 式 (1A.2.6) 应予以修改. 例如, 当 $\mathcal{L}$ 含有直到场量的 n 阶导数时, 可类似地导出

$$\frac{\delta S}{\delta\varphi_a} = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\varphi_a(x)} - \left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\varphi_{a,\mu}}\right)_{,\mu} + \left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\varphi_{a,\mu\nu}}\right)_{,\mu\nu} + \cdots + (-1)^n \left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\varphi_{a,\mu_1\cdots\mu_n}}\right)_{,\mu_1\cdots\mu_n} \tag{1A.2.7}$$

其中, $\varphi_{,\mu} \equiv \partial_\mu\varphi$, $\varphi_{,\mu\nu} \equiv \partial_\mu\partial_\nu\varphi$ 等. 这里的拉氏方程是在场量及场量的导数在边界 ∂M 上的变分为零的边界条件下得到的.

⟨3⟩ 经典场论的拉氏形式能使我们去建立守恒律并构建相应的守恒量. 而守恒定律在物理学中是很重要的, 因为它允许通过几个参量 (如荷、能量–动量、角动量、同位旋等) 来表征物理状况. 在封闭体系情形, 这些参量是运动常数 (守恒量), 它们直接与时空的对称性或与所研究体系的对称性相联系. 这些对称性在数学形式上表现为拉氏密度对于一定的数学变换所具有的不变性.

为了结果的普适性, 我们讨论拉氏密度明显依赖于 x 的情形 (这对应非封闭体系). 因而

$$S \equiv \int_M \mathrm{d}x\mathcal{L}(\varphi_a(x), \partial_\mu\varphi_a(x); x) \tag{1A.2.8}$$

考虑如下的无穷小变换 T：

$$x^\mu \to x'^\mu = x^\mu + \delta x^\mu \tag{1A.2.9}$$

$$\varphi_a(x) \to \varphi'_a(x') = \varphi_a(x) + \bar{\delta}\varphi_a(x) \tag{1A.2.10}$$

变换 T 虽然没有指定, 但不是完全任意的. 式 (1A.2.9) 为坐标变换. 式 (1A.2.10) 所表示的场量变化中, $\bar{\delta}\varphi_a(x)$ 称为 $\varphi_a(x)$ 的**全变分**. 我们将场量 $\varphi_a(x)$ 的**形式变分**(即仅有场量函数形式的变化, 而坐标不变) 记为

$$\delta\varphi_a(x) \, (\equiv \varphi'_a(x) - \varphi_a(x)) \tag{1A.2.11}$$

由此可知

$$\bar{\delta}\varphi_a(x) = \varphi'_a(x') - \varphi'_a(x) + \varphi'_a(x) - \varphi_a(x) = \delta x^\mu \partial_\mu \varphi'_a(x) + \delta\varphi_a(x)$$
$$\approx \delta x^\mu \partial_\mu \varphi_a(x) + \delta\varphi_a(x) \tag{1A.2.12}$$

其中, 略去了高阶小量.

下面讨论一种重要的变换：**对称变换**, 即能使场的运动方程保持形式不变的变换. 由于运动方程可以由作用泛函 S 对独立的动力学变量 $\varphi_a(x)$ 的变分而得到

$$\frac{\delta S}{\delta\varphi_a(x)} \equiv \mathcal{L}^a(x, \varphi_a(x)) = 0 \tag{1A.2.13}$$

其中, 简略记号 $\mathcal{L}^a(x,\varphi(x))$ 应理解为它不仅是坐标和场量的函数, 也是场量导数的函数. 在变换 T 下, 新方程等价于旧方程的充分条件之一是存在 $d+1$ 个函数 Q^ν 使得新作用量满足

$$S' \equiv \int_{M'} \mathrm{d}x' \mathcal{L}'(\varphi'_a(x'), \partial'_\mu \varphi'_a(x'); x') = \int_M \mathrm{d}x [\mathcal{L}(\varphi_a(x), \partial_\mu\varphi_a(x); x) + \partial_\nu Q^\nu] \tag{1A.2.14}$$

其中, $\mathcal{L}'$ 是新的拉氏密度; M' 是 M 在变换 T 下的映像; Q^ν 是场量和场量导数的函数. 条件虽然不能保证作用量的数值不变 (即 S' 不一定等于 S), 但若 $\delta\varphi_a(x)$ 满足边界条件 (1A.2.2), 则有

$$\delta S' = \delta S + \delta \int_M \mathrm{d}x \partial_\nu Q^\nu$$
$$= \delta S + \delta \int_{\partial M} \mathrm{d}\sigma_\nu Q^\nu(\varphi_a(x), \partial_\mu\varphi_a) = \delta S \tag{1A.2.15}$$

因此仅对于运动方程的协变性, 作用量的不变性并不是必须满足的.

由式 (1A.2.14) 可知, 新的拉氏密度 $\mathcal{L}'$ 不唯一地由 $\mathcal{L}$ 确定. 一般在拉氏密度的选取中有任意性. 故知 $\mathcal{L}'$ 作为新自变量的函数是不同于 $\mathcal{L}$ 的, 这样对应的新运动方程

$$\frac{\delta S'}{\delta\varphi'_a(x')} \equiv \mathcal{L}'^{\mathrm{a}}(x', \varphi'_a(x')) = 0 \tag{1A.2.16}$$

在形式上是不同于旧运动方程 (1A.2.13) 的. 但是对于对称变换, 则应有

$$\mathcal{L}'^a(x, \varphi_a(x)) = \mathcal{L}^a(x, \varphi_a(x)) \tag{1A.2.17}$$

要使上式成立, 只要对于 Q^ν 的一个确定选择, 使得拉氏密度的函数形式不变：

$$\mathcal{L}'(\varphi_a(x), \partial_\mu\varphi_a(x); x) = \mathcal{L}(\varphi_a(x), \partial_\mu\varphi_a(x); x) \tag{1A.2.18}$$

就能办到. 式 (1A.2.18) 可以表述为: **在变换 T 下, 若拉氏密度的函数形式保持不变, 则变换 T 是对称变换**.

由式 (1A.2.14) 和式 (1A.2.18) 可知, 作用量的全变分为

$$\begin{aligned}\bar{\delta} S &\equiv \int_{M'} \mathrm{d}x' \mathcal{L}'(\varphi_a'(x'), \partial_\mu' \varphi_a'(x'); x') - \int_M \mathrm{d}x \mathcal{L}(\varphi_a(x), \partial_\mu \varphi_a(x); x) \\ &= \int_M \mathrm{d}x \partial_\nu Q^\nu \end{aligned} \tag{1A.2.19}$$

另外

$$\begin{aligned}\bar{\delta} S &\equiv \bar{\delta} \int_M \mathrm{d}x \mathcal{L} = \int_M \mathrm{d}x \bar{\delta} \mathcal{L} + \int_M \delta(\mathrm{d}x) \mathcal{L} \\ &= \int_M \mathrm{d}x (\delta \mathcal{L} + \delta x^\mu \partial_\mu \mathcal{L}) + \int_M \mathrm{d}x \partial_\mu (\delta x^\mu) \mathcal{L}\end{aligned} \tag{1A.2.20}$$

这里我们利用了如下关系式:

$$\delta(\mathrm{d}x) = \partial_\mu (\delta x^\mu) \mathrm{d}x \tag{1A.2.21}$$

及

$$\bar{\delta} = \delta + \delta x^\mu \partial_\mu \tag{1A.2.22}$$

式 (1A.2.21) 可证明如下:

因 $\partial_\nu x'^\mu = \delta_\nu^\mu + \partial_\nu (\delta x^\mu)$, 而 $x'^\mu \to x^\mu$ 变换的雅可比行列式为

$$\det \left(\frac{\partial x'^\mu}{\partial x^\nu} \right) = \det(\delta_\nu^\mu + \partial_\nu (\delta x^\mu)) = 1 + \partial_\mu (\delta x^\mu) + 0(\delta x)$$

故有

$$\mathrm{d}x' = \det \left(\frac{\partial x'^\mu}{\partial x^\nu} \right) \mathrm{d}x = [1 + \partial_\mu (\delta x^\mu)] \mathrm{d}x \tag{1A.2.23}$$

注意到 $\delta(\mathrm{d}x) \equiv \mathrm{d}x' - \mathrm{d}x$, 显然式 (1A.2.23) 正是式 (1A.2.21). 式 (1A.2.22) 是式 (1A.2.12) 的推广, 其证明是类似的.

另外, 还可以如下验证式 (1A.2.20) 中所用方法的合理性. 由式 (1A.2.19) 可知

$$\begin{aligned}\bar{\delta} S &= \int_{M'} \mathrm{d}x' \mathcal{L}(\varphi_a'(x'), \partial_\mu' \varphi_a'(x'); x') - \int_{M'} \mathrm{d}x' \mathcal{L}(\varphi_a(x'), \partial_\mu' \varphi_a(x'); x') \\ &\quad + \int_{M'} \mathrm{d}x' \mathcal{L}(\varphi_a(x'), \partial_\mu' \varphi_a(x'); x') - \int_M \mathrm{d}x \mathcal{L}(\varphi_a(x), \partial_\mu \varphi_a(x); x) \\ &= \int_{M'} \mathrm{d}x' \delta \mathcal{L}(\varphi_a(x'), \partial_\mu' \varphi_a(x'); x') + \int_M \mathrm{d}x [1 + \partial_\lambda (\delta x^\lambda)] \mathcal{L}(\varphi_a(x'), \partial_\mu' \varphi_a(x'); x') \\ &\quad - \int_M \mathrm{d}x \mathcal{L}(\varphi_a(x), \partial_\mu \varphi_a(x); x)\end{aligned} \tag{1A.2.24}$$

略去高阶小量后, 上式正是式 (1A.2.20). 由此还可得知拉氏密度的形式变分为

$$\begin{aligned}\delta\mathcal{L}(\varphi_a(x),\partial_\mu\varphi_a(x);x) &\equiv \mathcal{L}(\varphi'_a(x),\partial_\mu\varphi'_a(x);x)-\mathcal{L}(\varphi_a(x),\partial_\mu\varphi_a(x);x)\\ &=\delta\varphi_a(x)\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\varphi_a}+\delta(\partial_\mu\varphi_a(x))\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\partial_\mu\varphi_{\dashv}}\\ &=\delta\varphi_a\left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\varphi_a}-\partial_\mu\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\partial_\mu\varphi_a}\right)+\partial_\mu\left(\delta\varphi_a\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\partial_\mu\varphi_a}\right)\end{aligned} \tag{1A.2.25}$$

将式 (1A.2.20) 和式 (1A.2.25) 代入式 (1A.2.19), 并利用积分区域的任意性可知, 对于任何生成对称变换的 δx 和 $\delta\varphi_a$ 有

$$\delta\mathcal{L}+\partial_\lambda(\mathcal{L}\delta x^\lambda-Q^\lambda)\equiv 0 \tag{1A.2.26}$$

或者

$$\delta\varphi_a\frac{\delta S}{\delta\varphi_a}+\partial_\mu j^\mu\equiv 0 \tag{1A.2.27}$$

其中

$$j^\mu=\delta x^\mu\mathcal{L}+\delta\varphi_a\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\partial_\mu\varphi_a}-Q^\mu \tag{1A.2.28}$$

诺特 (Noether) 恒等式 (1A.2.27) 反映了无穷小连续对称变换和 j^μ 的关系.

注意: 若运动方程满足 (即 $\dfrac{\delta S}{\delta\varphi_a(x)}=0$), 式 (1A.2.27) 给出了**守恒定律**

$$\partial_\mu j^\mu=0 \tag{1A.2.29}$$

但当 φ_a 并不是全部为遵守运动方程的动力学变量时, 式 (1A.2.27) 不必导致守恒定律.

由守恒方程式 (1A.2.29) 可以从**诺特守恒流**j^μ 构建出守恒量. 为此可如下进行.

(1) 考虑两个类空超曲面 σ_1 和 σ_2 及连接它们的类时超曲面 $\overline{\sigma}$ 所局限的区域 $\varOmega$, 其中 σ_2 在时间上比 σ_1 迟. 将式 (1A.2.29) 对区域 $\varOmega$ 积分:

$$\int_\varOmega \mathrm{d}x\partial_\mu j^\mu=0 \tag{1A.2.30}$$

利用高斯定理得到在 $\varOmega$ 的边界 $\partial\varOmega(=\sigma_1+\sigma_2+\overline{\sigma})$ 上的积分:

$$\int_{\partial\varOmega}\mathrm{d}\sigma_\mu j^\mu=\int_{\partial\varOmega}\mathrm{d}\sigma n_\mu j^\mu=0 \tag{1A.2.31}$$

其中, $\mathrm{d}\sigma_\mu$ 是超面 $\partial\varOmega$ 的面元在与 n_μ 方向 (或与 x^μ 轴方向) 垂直的平面上的投影; $\mathrm{d}\sigma$ 为 $\partial\varOmega$ 的面元.

(2) 现在让积分区域沿空间作无限的扩张, 而在时间方向上用类空超面 σ_1 和 σ_2 来限定. 由式 (1A.2.31) 得

$$\int_{\sigma_2} \mathrm{d}\sigma n_\mu j^\mu - \int_{\sigma_1} \mathrm{d}\sigma n_\mu j^\mu + \int_{\overline{\sigma}} \mathrm{d}\sigma n_\mu j^\mu = 0$$

故当

$$\int_{\overline{\sigma}} \mathrm{d}\sigma n_\mu j^\mu = 0 \tag{1A.2.32}$$

则得

$$\int_{\sigma_2} \mathrm{d}\sigma n_\mu j^\mu = \int_{\sigma_1} \mathrm{d}\sigma n_\mu j^\mu \tag{1A.2.33}$$

为使式 (1A.2.37) 中的通量积分为零, 只需场在空间无限处具有适当的边界条件即可. 由上式知

$$\rho \equiv \int_{\sigma} \mathrm{d}\sigma n_\mu j^\mu \tag{1A.2.34}$$

实际上是和曲面 σ 无关的**运动积分**(**守恒量**).

特别地, 当曲面 σ 是三维平面 $x^0 = t = \mathrm{const}$ 时, 式 (1A.2.39) 成为纯 d 维空间积分, 若 $\mathrm{d}x = \mathrm{d}t\mathrm{d}\underline{x}$, 则有

$$\rho = \int \mathrm{d}\underline{x}\, j^0 = \mathrm{const} \tag{1A.2.35}$$

它是与时间无关的守恒量, 称为**诺特荷**. 只要具有适当的边界条件, 对于对称变换均存在这样一个守恒量.

附录 1B　场的能量和动量

现在考虑**时空平移变换**:

$$x'^\mu = x^\mu + a^\mu \quad (a = \mathrm{const}) \tag{1B.1}$$

此时对于封闭体系, 场量的变化应该为

$$\phi'(x') = \phi(x) \tag{1B.2}$$

故有

$$\begin{cases} \delta x^\mu = a^\mu \\ \delta\phi(x) = \overline{\delta}\phi(x) - \delta x^\mu \partial_\mu \phi(x) = -a^\mu \partial_\mu \phi(x) \end{cases} \tag{1B.3}$$

时空平移不变性要求上述变换应为对称变换. 这样由式 (1A.2.28) 可知, 诺特守恒流为 (取 $Q=0$)

$$j^{\mu}=\delta x^{\mu}\mathcal{L}+\delta\varphi_a\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\partial_{\mu}\varphi_a}=-a^{\nu}\left[\partial_{\nu}\phi(x)\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\partial_{\mu}\varphi_a}-\delta^{\mu}_{\nu}\mathcal{L}\right]$$

代入守恒方程 (1A.2.29), 得到**能量 –动量守恒方程**

$$\partial_{\mu}T^{\mu\nu}=0 \tag{1B.4}$$

其中, $T^{\mu\nu}$ 为**能量 –动量张量**:

$$T^{\mu\nu}=\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\partial_{\mu}\varphi_a}\partial^{\nu}\phi(x)-g^{\mu\nu}\mathcal{L} \tag{1B.5}$$

再代入式 (1A.2.40) 可得相应的守恒 “荷”:

$$P^{\nu}=\int \mathrm{d}^d x T^{0\nu}=\int \mathrm{d}^d x\left[\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_0\varphi_a)}\partial^{\nu}\phi(x)-g^{0\nu}\mathcal{L}\right] \tag{1B.6}$$

显然**总能量**为

$$P^0=\int \mathrm{d}^d x T^{00}=\int \mathrm{d}^d x\left[\pi(x)\dot{\phi}(x)-\mathcal{L}\right] \tag{1B.7}$$

总动量为

$$P^i=-\int \mathrm{d}^d x\pi(x)\partial_i\phi(x) \tag{1B.8}$$

第二章 图形微扰论 (零温)

第一节 引 论

尽管绝对零温在实验上不能达到, 但由于如下理由, 我们仍可以考虑体系在零温时的性质：① 这样常能给出该体系在低温下的一些性质的某种观念; ② 这种体系的激发能也许很大, 使得在某些情形无需考虑依赖于温度的效应; ③ 对于实验上感兴趣的许多体系, 其费米能 ε_{F} 远大于 $K_{\mathrm{B}}T$(K_{B} 为玻尔兹曼常量, T 为室温). 这时我们可以从对体系的 "关联" "元激发" 等性质的零温计算中获得许多重要信息, 它们甚至可能在相当高温度下也是有用的.

一旦考虑有外场特别是粒子之间有相互作用的体系, 我们经常会遇到无法精确求解场方程的问题, 例如, 第一章中的有外场 $V(\underline{x})$ 的场方程 (1.3.2), 当 $V(\underline{x})$ 复杂时往往就是这种情况. 特别是既处于外场 V_1 又有两粒子相互作用势 V_2 的粒子体系, 其算符薛定谔方程 (1.3.47) 就是一个十分复杂的难于求解的微分–积分方程. 如果我们不能找到场方程的模解, 那么我们所给出的场算符按产生和消灭算符表达的关系式 (1.3.12) 以及所给出的量子化关系只不过是一种纯粹的形式. 幸好我们可以借助于表象变换来实现场方程的简化. 原来前面的场方程 (海森伯运动方程) 是在海森伯绘景中给出的, 我们可以在所谓相互作用绘景中去简化场方程进而去求解方程. 在此基础上, 人们能借助于格林函数这一重要的理论工具以及用于计算格林函数的图形微扰论来提取所需要的物理信息. 在具体讨论该绘景之前, 我们先给出以后常用的一个算符微分方程的解.

设算符 $\hat{F}(t)$ 所满足的微分方程及其初始条件为

$$\frac{\mathrm{d}\hat{F}(t)}{\mathrm{d}t}=\hat{A}(t)\hat{F}(t) \tag{2.1.1}$$

$$\hat{F}(0)=1 \tag{2.1.2}$$

若算符 $\hat{A}(t)$ 不显含时间 t, 则满足初始条件 (2.1.2) 的解显然为

$$\hat{F}(t)=\mathrm{e}^{t\hat{A}} \tag{2.1.3}$$

但是当 $\hat{A}(t)$ 显含时间 t 时, 式 (2.1.1) 的解不是式 (2.1.3). 此时可将式 (2.1.1) 和式 (2.1.2) 统一成如下的积分方程：

$$\hat{F}(t)=1+\int_0^t \mathrm{d}t_1\hat{A}(t_1)\hat{F}(t_1) \tag{2.1.4}$$

再使用迭代法求解, 有

$$
\begin{aligned}
\hat{F}(t) =& 1+\int_0^t \mathrm{d}t_1 \hat{A}(t_1)+\int_0^t \mathrm{d}t_1 \int_0^{t_1} \mathrm{d}t_2 \hat{A}(t_1)\hat{A}(t_2)\hat{F}(t_2)=\cdots \\
=& 1+\int_0^t \mathrm{d}t_1 \hat{A}(t_1)+\int_0^t \mathrm{d}t_1 \int_0^{t_1} \mathrm{d}t_2 \hat{A}(t_1)\hat{A}(t_2)+\cdots \\
&+\int_0^t \mathrm{d}t_1 \int_0^{t_1} \mathrm{d}t_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} \mathrm{d}t_n \hat{A}(t_1)\hat{A}(t_2)\cdots\hat{A}(t_n)+\cdots
\end{aligned}
\tag{2.1.5}
$$

只要式 (2.1.5) 收敛即可得到迭代解.

为了得到更方便的形式, 考虑 $n=2$ 的项, 注意到

$$
\int_0^t \mathrm{d}t_1 \int_0^{t_1} \mathrm{d}t_2 \hat{A}(t_1)\hat{A}(t_2)=\int_0^t \mathrm{d}t_1 \int_0^{t} \mathrm{d}t_2 \theta(t_1-t_2)\hat{A}(t_1)\hat{A}(t_2) \tag{2.1.6}
$$

$$
\begin{aligned}
\int_0^t \mathrm{d}t_1 \int_0^{t_1} \mathrm{d}t_2 \hat{A}(t_1)\hat{A}(t_2) &\xlongequal{t_1\leftrightarrow t_2} \int_0^t \mathrm{d}t_2 \int_0^{t_2} \mathrm{d}t_2 \hat{A}(t_2)\hat{A}(t_1) \\
&= \int_0^t \mathrm{d}t_2 \int_0^{t} \mathrm{d}t_1 \theta(t_2-t_1)\hat{A}(t_2)\hat{A}(t_1)
\end{aligned}
\tag{2.1.7}
$$

由式 (2.1.6) 及式 (2.1.7) 得

$$
\begin{aligned}
\int_0^t \mathrm{d}t_1 \int_0^{t_1} \mathrm{d}t_2 \hat{A}(t_1)\hat{A}(t_2) &= \frac{1}{2}\int_0^t \mathrm{d}t_1 \int_0^{t} \mathrm{d}t_2 [\theta(t_1-t_2)\hat{A}(t_1)\hat{A}(t_2)+\theta(t_2-t_1)\hat{A}(t_2)\hat{A}(t_1)] \\
&= \frac{1}{2}\int_0^t \mathrm{d}t_1 \int_0^{t_1} \mathrm{d}t_2 \overline{T}\hat{A}(t_1)\hat{A}(t_2)
\end{aligned}
\tag{2.1.8}
$$

其中, 我们引入了编时算符 $\overline{T}$:

$$
\begin{aligned}
\overline{T}\hat{A}(t_1)\hat{A}(t_2) &\equiv \theta(t_1-t_2)\hat{A}(t_1)\hat{A}(t_2)+\theta(t_2-t_1)\hat{A}(t_2)\hat{A}(t_1) \\
&= \begin{cases} \hat{A}(t_1)\hat{A}(t_2) & (t_1>t_2) \\ \hat{A}(t_2)\hat{A}(t_1) & (t_1<t_2) \end{cases}
\end{aligned}
\tag{2.1.9}
$$

$\overline{T}$ 的作用是使得算符乘积中的因子按时间增加的次序从右向左排列, 即时间靠前的算符排在时间靠后的算符的右边.

类似地也有

$$
\begin{aligned}
&\int_0^t \mathrm{d}t_1 \int_0^{t_1} \mathrm{d}t_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} \mathrm{d}t_n \hat{A}(t_1)\hat{A}(t_2)\cdots\hat{A}(t_n) \\
=&\frac{1}{n!}\int_0^t \mathrm{d}t_1 \int_0^{t} \mathrm{d}t_2 \cdots \int_0^{t} \mathrm{d}t_n \overline{T}\hat{A}(t_1)\hat{A}(t_2)\cdots\hat{A}(t_n)
\end{aligned}
\tag{2.1.10}
$$

这样式 (2.1.1) 的迭代解最后可写成 (**Dyson 展开**)

$$F(t)=1+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}\int_0^t \mathrm{d}t_1\int_0^t \mathrm{d}t_2\cdots\int_0^t \mathrm{d}t_n\overline{T}\hat{A}(t_1)\hat{A}(t_2)\cdots\hat{A}(t_n)\equiv\overline{T}\mathrm{e}^{\int_0^t \mathrm{d}t'\hat{A}(t')} \tag{2.1.11}$$

第二节　相互作用绘景与 S 矩阵

若无特别声明, 我们约定态矢量及算符在薛定谔绘景、海森伯绘景及相互作用绘景中所采用的符号, 见表 2.2.1.

表 2.2.1　三种绘景中的态矢量和算符的符号

		薛定谔绘景	海森伯绘景	相互作用绘景
态矢量		$\|\psi_{\mathrm{S}}(t)\rangle\equiv\|\psi(t)\rangle$	$\|\psi_{\mathrm{H}}\rangle\equiv\|\psi\rangle$	$\|\psi_{\mathrm{I}}(t)\rangle$
算符	不显含时间算符	$\hat{A}_{\mathrm{S}}\equiv\hat{A}$	$\hat{A}_{\mathrm{H}}(t)\equiv\hat{A}(t)$	$\hat{A}_{\mathrm{I}}(t)$
	显含时间算符	$\hat{A}_{\mathrm{S}}(t)\equiv\hat{A}_t$	$\hat{A}_{t\mathrm{H}}(t)\equiv\hat{A}_t(t)$	$\hat{A}_{t\mathrm{I}}(t)$

表 2.2.1 中, 下标 S、H、I 分别代表这三种不同绘景. 但在某些特殊章节, 如本章第五节和第六节等, 我们将作特别声明, 虽然采用相互作用绘景, 但为了书写方便, 也略去了角标 I.

一、薛定谔绘景

在薛定谔绘景中, 态矢量随时间变化且由薛定谔方程确定:

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle=\hat{H}_t|\psi(t)\rangle \tag{2.2.1}$$

尽管态矢量随时间变化但任何不显含时间的算符 $\hat{A}$ (如不显含时间的哈密顿算符) 则不随时间变化.

现引入薛定谔绘景中的时间演化算符 $u(t,t_0)$ (它是不遵守上述符号约定的例外), 使得

$$|\psi(t)\rangle\equiv u(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle \tag{2.2.2}$$

代入式 (2.1.1) 易知有

$$\begin{cases}\mathrm{i}\dfrac{\partial}{\partial t}u(t,t_0)=\hat{H}_t u(t,t_0)\\ u(t_0,t_0)=1\end{cases} \tag{2.2.3}$$

由此可知

$$u(t,t_0)=\overline{T}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_{t_0}^t \mathrm{d}t'\hat{H}_{t'}}$$

但通常情形, $\hat{H}$ 并不显含时间, 此时有

$$u(t,t_0)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(t-t_0)\hat{H}} \tag{2.2.4}$$

很容易证明时间演化算符 $u(t,t_0)$ 是幺正算符并具有传递性. 后者意味着

$$u(t,t')u(t',t_0)=u(t,t_0)$$

二、海森伯绘景

定义海森伯绘景中的态矢量为

$$|\psi\rangle\equiv u^{+}(t,t_0)|\psi(t)\rangle=|\psi(t_0)\rangle \tag{2.2.5}$$

即海森伯绘景中的态矢量不随时间变化. 该绘景中的算符 $\hat{A}_t(t)$ 定义为

$$\hat{A}_t(t)\equiv u^{+}(t,t_0)\hat{A}_t u(t,t_0) \tag{2.2.6}$$

将上式对时间求导得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{A}_t(t)=\mathrm{i}[\hat{H}_t(t),\hat{A}_t(t)]+\left(\frac{\mathrm{d}\hat{A}_t}{\mathrm{d}t}\right)(t) \tag{2.2.7}$$

在通常不显含时间情形 $\hat{A}_t\equiv\hat{A}_{\mathrm{S}}(t)=\hat{A}$ 以及 $\hat{H}_t=\hat{H}=\hat{H}(t)$ 时, 代替上式的是

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{A}(t)=\mathrm{i}[\hat{H},\hat{A}(t)] \tag{2.2.7a}$$

式 (2.2.7) 和式 (2.2.7a) 称为**海森伯运动方程**.

三、相互作用绘景

设体系的总哈密顿 $\hat{H}$ 可写成如下形式:

$$\hat{H}_t=\hat{H}_0+\hat{H}'_t \tag{2.2.8}$$

其中, $\hat{H}_0$ 不显含时间; $\hat{H}'_t$ 是薛定谔绘景中的相互作用哈密顿. 定义相互作用绘景中的态矢量为

$$|\hat{\psi}_{\mathrm{I}}(t)\rangle\equiv u_0^{+}(t,t_0)|\psi(t)\rangle \tag{2.2.9}$$

其中, $u_0(t,t_0)$ 是薛定谔绘景中由 $\hat{H}_0$ 所确定的时间演化算符, 它满足在式 (2.2.4) 中将 $\hat{H}$ 用 $\hat{H}_0$ 代替所得到的方程, 即 $u_0(t,t_0)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(t-t_0)\hat{H}_0}$.

定义

$$\hat{A}_{t\mathrm{I}}(t)\equiv u_0^{+}(t,t_0)\hat{A}_t u_0(t,t_0) \tag{2.2.10}$$

分别对式 (2.2.9) 和式 (2.2.10) 求导, 可得

$$\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi_{\mathrm{I}}(t)\rangle = \hat{H}'_{t\mathrm{I}}(t)|\psi_{\mathrm{I}}(t)\rangle \tag{2.2.11}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{A}_{t\mathrm{I}}(t) = \mathrm{i}[\hat{H}_0, \hat{A}_{t\mathrm{I}}(t)] + \left(\frac{\mathrm{d}\hat{A}_t}{\mathrm{d}t}\right)_{\mathrm{I}}(t) \tag{2.2.12}$$

注意 $\hat{H}_0(t) = \hat{H}_0$. 通常情形式 (2.2.12) 右边最后一项为零. 在相互作用绘景中, 态矢量的时间演化仅由相互作用哈密顿决定, 而算符却满足无相互作用时的 “自由体系” 的运动方程.

令相互作用绘景中的时间演化算符为 $S(t, t_0)$:

$$|\psi_{\mathrm{I}}(t)\rangle \equiv S(t, t_0)|\psi_{\mathrm{I}}(t_0)\rangle \tag{2.2.13}$$

由式 (2.2.9) 及式 (2.2.2) 可知

$$S(t, t_0) = u_0^+(t, t_0)u(t, t_0) \tag{2.2.14}$$

它同样具有幺正性和传递性. 也可以通过幺正算符 $S(t, t_0)$ 将相互作用绘景和海森伯绘景联系起来.

$$\begin{cases} |\psi_{\mathrm{I}}(t)\rangle = S(t, t_0)|\psi\rangle \\ \hat{A}_{\mathrm{I}}(t) = S(t, t_0)\hat{A}(t)S^+(t, t_0) \end{cases} \tag{2.2.15}$$

由于这三种绘景都是通过幺正算符联系的, 所以它们在物理上是等价的.

四、散射矩阵

本章后面各节的讨论中, 都设 $\hat{H}$ 不显含时间.

由式 (2.2.13) 及式 (2.2.11) 易知 $S(t, t_0)$ 是满足如下关系的幺正算符:

$$\begin{cases} \mathrm{i}\dfrac{\partial}{\partial t}S(t, t_0) = \hat{H}'_{\mathrm{I}}(t)S(t, t_0) \\ S(t_0, t_0) = 1 \end{cases} \tag{2.2.16}$$

其中, $\hat{H}'_{\mathrm{I}}(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(t-t_0)\hat{H}_0}\hat{H}'\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(t-t_0)\hat{H}_0}$, 由于 $\hat{H}_0, \hat{H}'$ 一般不对易, 故 $\hat{H}'_{\mathrm{I}}(t)$ 显含时间. 所以算符微分方程 (2.2.16) 的解应为

$$S(t, t_0) = \overline{T}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_1\hat{H}'_{\mathrm{I}}(t)} \tag{2.2.17}$$

出于以后的需要, 下面引入新的**编时算符 $\boldsymbol{T}$**:

$$T = (-1)^p\overline{T} \tag{2.2.18}$$

式中, p 是当算符乘积中的因子按时间次序重新排列时, 其中费米子算符之间进行对换的次数. 但由于 $\hat{H}'_{\rm I}(t)$ 中费米子算符总是成对出现的, 故 $\hat{H}'_{\rm I}(t)$ 可视为玻色子算符, 此时 T 与 $\overline{T}$ 的作用是等同的. 故式 (2.2.17) 可改写成

$$S(t,t_0)=T\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_1\hat{H}'_{\rm I}(t)} \tag{2.2.18a}$$

定义**散射矩阵 (S 矩阵)**为

$$\begin{aligned}S(\infty,-\infty)&\equiv T\exp\left[-\mathrm{i}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t\hat{H}'_{\rm I}(t)\right]\\&=T\exp\left[-\mathrm{i}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}^4x\hat{\mathcal{H}}'_{\rm I}(x)\right]\end{aligned} \tag{2.2.19}$$

其中, $\hat{\mathcal{H}}'_{\rm I}(x)$ 是相互作用绘景中的相互作用哈氏密度.

第三节　Gell-Mann Low 公式

考虑一个相互作用体系, 它的哈密顿 $\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}'$, 设它的基态 (最低能量本征态) 为 $|\psi_0^{(\rm H)}\rangle$, 上标 (H) 表示是对总哈密顿 $\hat{H}$ 而言的. 一般情形 $|\psi_0^{(\rm H)}\rangle$ 是不能精确求解的, 但是我们要求能够求得无相互作用哈密顿 $\hat{H}_0$ 所对应的基态 $|\varphi_0\rangle$ 和相应的基态能量 W_0 (其中 $|\varphi_0\rangle$ 与 $|\psi_0^{(\rm H)}\rangle$ 有同样的对称性), 即 $\hat{H}_0|\varphi_0\rangle=W_0|\varphi_0\rangle$ 是可解的. 那么我们能否借助于**无相互作用体系基态**$|\varphi_0\rangle$ 求得**相互作用体系基态**$|\psi_0^{(\rm H)}\rangle$ 呢? 在一定条件下, 我们能借助于绝热假设来实现这一目的.

绝热假设的基本思想是: 从 $\hat{H}_0$ 的一个本征态 $|\varPhi_0\rangle$ 开始非常缓慢地加上相互作用 $\hat{H}'$, 使得 $|\varPhi_0\rangle$ 能绝热地演化成有相互作用时的完全哈密顿的一个本征态 $|\varPsi_0^{(\rm H)}\rangle$. 为此我们可以方便地参数化这种施加相互作用的方式为

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}'_\varepsilon=\hat{H}_0+\mathrm{e}^{-\varepsilon|t|}\hat{H}' \tag{2.3.1}$$

其中, ε 是一个很小的正数. 当 $t\to\pm\infty$ 时, $\hat{H}\to\hat{H}_0$, 而当 $t\to 0$ 时, 我们得到了有相互作用时的系统的哈密顿. 在计算完成后取极限 $\varepsilon\to 0$.

Gell-Mann Low 定理证明了 (参见附录 2A) 在绝热假设下由 $|\varPhi_0\rangle$ 得到 $|\varPsi_0^{(\rm H)}\rangle$ 的可能, 该定理表述为

$$\frac{|\varPsi_0^{(\rm H)}\rangle}{\langle\varPhi_0|\varPsi_0^{(\rm H)}\rangle}=\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{|\varPsi_\varepsilon^{(\rm H)}\rangle}{\langle\varPhi_0|\varPsi_\varepsilon^{(\rm H)}\rangle}=\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{S_\varepsilon(0,-\infty)|\varPhi_0\rangle}{\langle\varPhi_0|S_\varepsilon(0,-\infty)|\varPhi_0\rangle} \tag{2.3.2}$$

是 $\hat{H}$ 的一个本征态 (若上式右边存在). 注意：这里保留极限中的分母是因为当 $\varepsilon\to 0$ 时, 分子分母可能各自不存在 (尽管分式整体是存在的). 但在以后的讨论中,

为符号的简化起见, 我们不考虑这一点, 只要在最终的结果中保留有分母的形式即可.

现在假设 $|\Phi_0\rangle$ 是 $\hat{H}_0$ 的基态 $|\varphi_0\rangle$, 那么按 Gell-Mann Low 定理, 当体系由 $|\varphi_0\rangle$ 绝热地演化后所得到的本征态 $|\Psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle$ 又会不会是 $\hat{H}$ 的基态呢? 答案在一般情形下是否定的. 但在特定情形下又是肯定的. 原来在演化过程中, 能级会代表性地显示 "**能级排斥**" 现象, 即若任何两个能级靠得很近, 在两个有同样对称性的态之间的矩阵元将使得它们相互推斥, 这是由于选择定则阻止有同样对称性的态之间混合. 但是在演化过程中, 也可能存在某个与基态对称性不同的激发态跨到比基态能量更低的能级上, 这种能级交叉导致 "**自发对称破缺**". 故绝热假设不能直接应用于超导和超流等现象. 一般来说, 当加上相互作用后若没有发生对称性改变的相变, 则绝热演化能导致体系从无作用体系的基态演化成相互作用体系的基态 $|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle$.

Gell-Mann Low 定理能够使我们把海森伯绘景中的算符的编时乘积对基态 $|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle$ 的平均值与相互作用绘景中算符的编时乘积对基态 $|\varphi_0\rangle$ 的平均值联系起来. 可以证明有

$$
\begin{aligned}
&\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|T\hat{A}(t_1)\hat{B}(t_2)\cdots\hat{D}(t_n)|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle\\
=&\langle\varphi_0|S(-\infty,\infty)T[\hat{A}_{\mathrm{I}}(t_1)\hat{B}_{\mathrm{I}}(t_2)\cdots\hat{D}_{\mathrm{I}}(t_n)S(\infty,-\infty)]|\varphi_0\rangle
\end{aligned}
\tag{2.3.3}
$$

证明 不妨先设 $t_1>t_2>\cdots>t_n$, 利用公式 $\hat{A}(t)=S(0,t)\hat{A}_{\mathrm{I}}(t)S^{\dagger}(0,t)$ 以及 $S^{+}(0\ \ -\infty)=S(-\infty,0)$, 从海森伯表象变换到相互作用表象则有

$$
\begin{aligned}
&\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|T\hat{A}(t_1)\hat{B}(t_2)\cdots\hat{D}(t_n)|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle\\
=&\langle\varphi_0|S^{+}(0,-\infty)S(0,t_1)\hat{A}_{\mathrm{I}}(t_1)S(t_1,0)\cdots S(0,t_n)\hat{D}_{\mathrm{I}}(t_n)S(t_n,0)S(0,-\infty)|\varphi_0\rangle\\
=&\langle\varphi_0|S^{+}(\infty,-\infty)S(\infty,t_1)\hat{A}_{\mathrm{I}}(t_1)S(t_1,t_2)\cdots S(t_{n-1},t_n)\hat{D}_{\mathrm{I}}(t_n)S(t_n,-\infty,|\varphi_0\rangle\\
=&\langle\varphi_0|S(-\infty,\infty)T[\hat{A}_{\mathrm{I}}(t_1)\cdots\hat{D}_{\mathrm{I}}(t_n)S(\infty,-\infty)]|\varphi_0\rangle
\end{aligned}
$$

虽然在特定的时间排序下推出了式 (2.3.3), 但显然对于任意的时间排序, 上式也是正确的. 根据绝热假设, $S(\infty,-\infty)|\varphi_0\rangle$ 也是自由粒子体系的基态, 但由于系统的基态 (即能量最低态) 是非简并的, 所以它与 $|\varphi_0\rangle$ 最多相差一相因子, 即 $S(\infty,-\infty)|\varphi_0\rangle=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}|\varphi_0\rangle$. 这样有

$$
\langle\varphi_0|S(-\infty,\infty)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}\langle\varphi_0|=\frac{\langle\varphi_0|}{\langle\varphi_0|S(-\infty,\infty)|\varphi_0\rangle}
\tag{2.3.4}
$$

由此可得

$$
\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|T\hat{A}(t_1)\hat{B}(t_2)\cdots\hat{D}(t_n)|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle
$$

$$=\frac{\langle\varphi_0|T[\hat{A}_{\rm I}(t_1)\hat{B}_{\rm I}(t_2)\cdots\hat{D}_{\rm I}(t_n)S(\infty,-\infty)]|\varphi_0\rangle}{\langle\varphi_0|S(\infty,-\infty)|\varphi_0\rangle} \tag{2.3.5}$$

这是著名的 **Gell-Mann Low 公式**, 它是量子场论中微扰论的出发点.

第四节　单体格林函数

格林函数是一种重要的解析工具, 我们可以利用它来提取所研究体系的许多基本物理信息.

一、定义

坐标空间中零温单体完全格林函数 (或相互作用格林函数) 定义为

$$\mathrm{i}G_{\alpha\beta}(x,x')\equiv\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|T\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}_\beta^+(x')|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle \tag{2.4.1}$$

其中, 下标 α,β 是自旋指标 (若自旋为零, 可去掉该指标); $x=(\underline{x},t)$ 等; $|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle$ 代表相互作用体系的基态, 与 $|\varphi_0\rangle$ 不同, $|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle$ 是未知的, 不便于进行计算. 所以我们计算时需要将式 (2.4.1) 转换到相互作用绘景中去, 利用 Gell-Mann Low 公式得

$$\mathrm{i}G_{\alpha\beta}(x,x')=\frac{\langle\varphi_0|T[\hat{\psi}_{\alpha\mathrm{I}}(x)\hat{\psi}_{\beta\mathrm{I}}^+(x')S(\infty,-\infty)]|\varphi_0\rangle}{\langle\varphi_0|S(\infty,-\infty)|\varphi_0\rangle} \tag{2.4.2}$$

这个公式是零温情形下的图形微扰论的基础.

若哈密顿与时间无关, 则 G 是时间差 $t-t'$ 的函数, 即

$$G_{\alpha\beta}(x,x')\equiv G_{\alpha\beta}(\underline{x},\underline{x}';t-t') \tag{2.4.3}$$

若同时还满足空间平移不变性, 则

$$G_{\alpha\beta}(x,x')\equiv G_{\alpha\beta}(\underline{x}-\underline{x}';t-t')=G_{\alpha\beta}(x-x') \tag{2.4.4}$$

若相互作用与自旋无关, 则

$$G_{\alpha\beta}(x,x')=G(x,x')\delta_{\alpha\beta} \tag{2.4.5}$$

定义

$$G_{\alpha\beta}(x)\equiv G_{\alpha\beta}(x,0) \tag{2.4.6}$$

注意 $G(x)=G(\underline{x},t)$ 在 $t=0$ 处不连续. 事实上有

$$G(\underline{x},0^+)-G(\underline{x},0^-)=-\mathrm{i}\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|T\left(\hat{\psi}(\underline{x},0^+)\hat{\psi}^+(\underline{0},0)-\hat{\psi}(\underline{x},0^-)\hat{\psi}^+(\underline{0},0)\right)|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle$$

$$= -\mathrm{i}\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|\left[[\hat{\psi}(\underline{x},0),\hat{\psi}^+(\underline{0},0)]_\mp\right]|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle = -\mathrm{i}\delta(\underline{x}) \tag{2.4.7}$$

现在我们来了解**单体格林函数的物理意义**. 根据编时算符的定义知

$$\mathrm{i}G_{\alpha\beta}(x,x') = \begin{cases} \langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}_\beta^+(x')|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle & (t > t') \\ \pm\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|\hat{\psi}_\beta^+(x')\hat{\psi}_\alpha(x)|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle & (t < t') \end{cases}$$

利用式 (2.2.15) 可知, $|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle = S(t_0,t)|\psi_{0\mathrm{I}}(t)\rangle$ (其中, $|\psi_{0\mathrm{I}}(t)\rangle$ 是相互作用绘景中和 $|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle$ 对应的态), 以及 $\hat{\psi}_{\alpha\mathrm{I}}(x) = S(t,t_0)\hat{\psi}_\alpha(x)S(t_0,t)$. 由此可得出在 $t > t'$ 时的格林函数为

$$\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}_\beta^+(x')|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle = \langle\psi_{0\mathrm{I}}(t)|\hat{\psi}_{\alpha\mathrm{I}}(x)S(t,t')\hat{\psi}_{\beta\mathrm{I}}^+(x')|\psi_{0\mathrm{I}}(t')\rangle$$

这正是粒子从 t' 时刻的初态 $\hat{\psi}_{\beta\mathrm{I}}^+(x')|\psi_{0\mathrm{I}}(t')\rangle$ 到 t 时刻的终态 $\hat{\psi}_{\alpha\mathrm{I}}^+(x)|\psi_{0\mathrm{I}}(t)\rangle$ 的跃迁概率幅. 它描述的是一个自旋为 β 的粒子从 x' 出发到 x 成为一个自旋为 α 的粒子的传播和实现这种传播的概率幅.

类似地可知, 当 $t < t'$ 时, 格林函数描述的是一个粒子的 **“逆时” 传播**和实现这种传播的概率幅. 如果粒子是费米子 (如电子), 则粒子的 “逆时” 传播可视为 “空穴” 的传播; 如果粒子是玻色子, 则 “顺时传播” 和 “逆时传播” 可分别视为玻色子的发射和吸收. 这在以后再详细讨论.

动量空间中单体格林函数定义为

$$\mathrm{i}G_{\alpha\beta}(\underline{p}t,\underline{p}'t') \equiv \langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|T\hat{c}_{\underline{p}\alpha}(t)\hat{c}_{\underline{p}'\beta}^+(t')|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle \tag{2.4.8}$$

其中, $\hat{c}_{\underline{p}\alpha}(t)$ 和 $\hat{c}_{\underline{p}'\beta}^+(t')$ 为动量表象中的场算符, 即坐标表象中的场算符的傅里叶变换:

$$\hat{\psi}_\alpha(\underline{x},t) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\underline{p}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{p}\cdot\underline{x}}\hat{c}_{\underline{p}\alpha}(t) \tag{2.4.9}$$

$$\hat{\psi}_\alpha^+(\underline{x},t) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\underline{p}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\underline{p}\cdot\underline{x}}\hat{c}_{\underline{p}\alpha}^+(t) \tag{2.4.10}$$

借助于上两式, 不难验证动量空间格林函数是坐标空间格林函数的傅里叶变换, 满足

$$G_{\alpha\beta}(x,x') = \frac{1}{V}\sum_{\underline{p}\underline{p}'} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\underline{p}\cdot\underline{x}-\underline{p}'\cdot\underline{x}')}G_{\alpha\beta}(\underline{p}t,\underline{p}'t') \tag{2.4.11}$$

其逆傅里叶变换为

$$G_{\alpha\beta}(\underline{p}t,\underline{p}'t') = \frac{1}{V}\int \mathrm{d}^3x\mathrm{d}^3x'\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\underline{p}\cdot\underline{x}-\underline{p}'\cdot\underline{x}')}G_{\alpha\beta}(x,x') \tag{2.4.12}$$

对于空间平移不变体系, 有

$$G_{\alpha\beta}(\underline{p}t,\underline{p}'t')=\delta_{\underline{p}\underline{p}'}G_{\alpha\beta}(\underline{p}t,\underline{p}t')\equiv\delta_{\underline{p}\underline{p}'}G_{\alpha\beta}(\underline{p};t,t') \tag{2.4.13}$$

证明　由于对于空间平移不变体系, 格林函数仅依赖于空间坐标差, 故

$$\begin{aligned}G_{\alpha\beta}(\underline{p}t,\underline{p}'t')&=\frac{1}{V}\int\mathrm{d}^3x\mathrm{d}^3x'\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\underline{p}\cdot\underline{x}-\underline{p}'\cdot\underline{x}')}G_{\alpha\beta}(\underline{x}-\underline{x}';t,t')\\&=\frac{1}{V}\int\mathrm{d}^3(x-x')\mathrm{d}^3x'\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\underline{p}-\underline{p}')\cdot\underline{x}'}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\underline{p}\cdot(\underline{x}-\underline{x}')}G_{\alpha\beta}(t,t';\underline{x}-\underline{x}')\\&=\delta_{\underline{p}\underline{p}'}\int\mathrm{d}^3(x-x')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\underline{p}\cdot(\underline{x}-\underline{x}')}G_{\alpha\beta}(\underline{x}-\underline{x}';t,t')\\&=\delta_{\underline{p}\underline{p}'}G_{\alpha\beta}(\underline{p};t,t')\end{aligned}$$

即只有那些满足 $\underline{p}=\underline{p}'$ 的动量守恒要求的格林函数才不等于零. 故此时由式 (2.4.8) 知

$$\mathrm{i}G_{\alpha\beta}(\underline{p}t,\underline{p}t')\equiv\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|T\hat{c}_{\underline{p}\alpha}(t)\hat{c}^+_{\underline{p}\beta}(t')|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle \tag{2.4.14}$$

若取 $t'=0$, 则有

$$\mathrm{i}G_{\alpha\beta}(\underline{p}t,\underline{p}0)\equiv\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|T\hat{c}_{\underline{p}\alpha}(t)\hat{c}^+_{\underline{p}\beta}(0)|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle \tag{2.4.14a}$$

利用式 (2.4.9) 和式 (2.4.10) 不难证明, $G_{\alpha\beta}(\underline{p}t,\underline{p}0)$ 正是 $G_{\alpha\beta}(\underline{x}t)$ 的傅里叶变换.

$$G_{\alpha\beta}(\underline{p}t,\underline{p}0)=\int\mathrm{d}^3x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\underline{p}\cdot\underline{x}}G_{\alpha\beta}(\underline{x}t) \tag{2.4.15}$$

由此我们将 $G_{\alpha\beta}(\underline{p}t,\underline{p}0)$ 简记为

$$G_{\alpha\beta}(\underline{p}t)\equiv G_{\alpha\beta}(\underline{p}t,\underline{p}0) \tag{2.4.16}$$

式 (2.4.15) 的逆傅里叶变换为

$$G_{\alpha\beta}(\underline{x}t)=\frac{1}{V}\sum_{\underline{p}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{p}\cdot\underline{x}}G_{\alpha\beta}(\underline{p}t) \tag{2.4.17}$$

还可以通过对时间作傅里叶变换引入**频率 (能量) 动量空间格林函数**:

$$G_{\alpha\beta}(\underline{p}\omega,\underline{p}'\omega')\equiv\frac{1}{2\pi}\int\mathrm{d}t\mathrm{d}t'\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega t-\omega't')}G_{\alpha\beta}(\underline{p}t,\underline{p}'t') \tag{2.4.18}$$

$$G_{\alpha\beta}(\underline{p}t,\underline{p}'t')=\frac{1}{2\pi}\int\mathrm{d}\omega\mathrm{d}\omega'\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\omega t-\omega't')}G_{\alpha\beta}(\underline{p}\omega,\underline{p}'\omega') \tag{2.4.19}$$

对于时空平移不变体系, 由于坐标空间格林函数仅依赖于时空坐标差, 则有

$$G_{\alpha\beta}(x-x')=\frac{1}{V}\sum_{\underline{p}}\int\frac{\mathrm{d}\omega}{(2\pi)}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p\cdot(x-x')}G_{\alpha\beta}(\underline{p},\omega) \tag{2.4.20}$$

若采用**连续归一化**, 则有

$$G_{\alpha\beta}(x-x') = \int \frac{\mathrm{d}^4 p}{(2\pi)^4} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}p\cdot(x-x')} G_{\alpha\beta}(p) \tag{2.4.21}$$

$$G_{\alpha\beta}(p) \equiv G_{\alpha\beta}(\underline{p},\omega) = \int \mathrm{d}^4 x \mathrm{e}^{\mathrm{i}p\cdot x} G_{\alpha\beta}(x) \tag{2.4.22}$$

其中, $p \equiv (\underline{p},\omega)$; $G_{\alpha\beta}(x) \equiv G_{\alpha\beta}(x,0)$. $G_{\alpha\beta}(p)$ 就是四维动量空间中的格林函数.

二、 力学量的计算

格林函数含有足够的信息来计算力学量 (可观测量) 的基态平均值. 前面已指出, 一般的单体算符可以写成如下形式:

$$\hat{O} = \int \mathrm{d}^3 x \hat{\psi}^+_\alpha(\underline{x},t) \hat{O}_{\alpha\beta}(\underline{x}) \hat{\psi}_\beta(\underline{x},t) \tag{2.4.23}$$

其中, 重复的自旋指标自动求和. 它的**基态平均值**为

$$\langle \hat{O} \rangle \equiv \langle \psi_0^{(\mathrm{H})} | \hat{O} | \psi_0^{(\mathrm{H})} \rangle = \int \mathrm{d}^3 x \hat{O}_{\alpha\beta}(\underline{x}) \langle \psi_0^{(\mathrm{H})} | \hat{\psi}^+_\alpha(\underline{x},t^+) \hat{\psi}_\beta(\underline{x},t) | \psi_0^{(\mathrm{H})} \rangle$$

其中, 我们已将 $\hat{\psi}^+_\alpha(\underline{x},t)$ 中的时间 t 改成 $t^+ = t + 0^+$, 这个技巧的来源可参见本章第六节. 所以有

$$\begin{aligned} \langle \hat{O} \rangle &= \pm\mathrm{i} \int \mathrm{d}^3 x [\hat{O}_{\alpha\beta}(\underline{x}) G_{\beta\alpha}(\underline{x},t;\underline{x}',t^+)]_{\underline{x}'=\underline{x}} \\ &= \pm\mathrm{i} \int \mathrm{d}^3 x \mathrm{tr}[\hat{O}(\underline{x}) G(\underline{x},t;\underline{x}',t^+)]_{\underline{x}'=\underline{x}} \end{aligned} \tag{2.4.24}$$

其中, 求迹 tr 是对自旋指标进行的; 积分前的正负号分别对应玻色场和费米场.

对于**粒子数密度**$\langle \hat{n}(\underline{x}) \rangle$, 可以直接由 $\hat{n}(\underline{x}) \equiv \hat{\psi}^+_\alpha(\underline{x}) \hat{\psi}_\alpha(\underline{x})$ 得

$$\langle \hat{n}(\underline{x}) \rangle = \pm\mathrm{i}\mathrm{tr} G(\underline{x},t;\underline{x},t^+) \tag{2.4.25}$$

总动能算符$\hat{T}$ 对应于式 (2.4.23) 中的 $\hat{O}_{\alpha\beta}(\underline{x}) = -\dfrac{\boldsymbol{\nabla}_x^2}{2m}\delta_{\alpha\beta}$, 故

$$\langle \hat{T} \rangle = \pm\mathrm{i} \int \mathrm{d}^3 x \left[-\frac{\boldsymbol{\nabla}_x^2}{2m} \mathrm{tr} G(\underline{x},t;\underline{x}',t^+) \right]_{\underline{x}'=\underline{x}} \tag{2.4.26}$$

对于含有两体相互作用势的情形, 可以直接用后面要介绍的两体格林函数来计算, 但也可以利用海森伯运动方程来实现由单体格林函数作计算的目的. 利用场算符的对易关系 (参见式 (1.3.10)):

$$[\hat{\psi}_\alpha(\underline{x},t), \hat{\psi}_\beta(\underline{y},t)]_\mp = [\hat{\psi}^+_\alpha(\underline{x},t), \hat{\psi}^+_\beta(\underline{y},t)]_\mp = 0$$

$$[\hat{\psi}_\alpha(\underline{x},t),\hat{\psi}^+_\beta(\underline{y},t)]_\mp=\delta_{\alpha\beta}\delta^3(\underline{x}-\underline{y})$$

和对易子恒等式 $[\hat{A},\hat{B}\hat{C}]_-=[\hat{A},\hat{B}]_\pm\hat{C}\pm\hat{B}[\hat{A},\hat{C}]_\pm$, 以及式 (1.3.43), 并考虑自旋指标, 则

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\hat{\psi}_\alpha(\underline{x},t)=&\mathrm{i}[\hat{H},\hat{\psi}_\alpha(\underline{x},t)]\\=&\mathrm{i}\left[\int\mathrm{d}^3y\hat{\psi}^+_\beta(\underline{y},t)\hat{T}(\underline{y})\hat{\psi}_\beta(\underline{y},t)\right.\\&\left.+\frac{1}{2}\int\mathrm{d}^3y\mathrm{d}^3y'\hat{\psi}^+_\beta(\underline{y},t)\hat{\psi}^+_\gamma(\underline{y}',t)V_{\beta\gamma,\beta'\gamma'}(\underline{y},\underline{y}')\hat{\psi}_{\gamma'}(\underline{y}',t)\hat{\psi}_{\beta'}(\underline{y},t),\hat{\psi}_\alpha(\underline{x},t)\right]\\=&-\mathrm{i}\left(-\frac{\boldsymbol{\nabla}^2_x}{2m}\right)\hat{\psi}_\alpha(\underline{x},t)+(-\mathrm{i})\int\mathrm{d}^3y'\hat{\psi}^+_\gamma(\underline{y}',t)V_{\alpha\gamma,\beta'\gamma'}(\underline{x},\underline{y}')\hat{\psi}_{\gamma'}(\underline{y}',t)\hat{\psi}_{\beta'}(\underline{x},t)\end{aligned}$$

将上式两端左乘 $\hat{\psi}^+_\alpha(t',\underline{x}')$ 求基态平均并积分可得

$$\begin{aligned}&\int\mathrm{d}^3x\langle\psi^{\mathrm{H}}_0|\hat{\psi}^+_\alpha(\underline{x}',t')\left(\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\boldsymbol{\nabla}^2_x}{2m}\right)\hat{\psi}_\alpha(\underline{x},t)|\psi^{\mathrm{H}}_0\rangle\Bigg|_{\substack{\underline{x}'=\underline{x}\\t'=t^+}}\\=&\int\mathrm{d}^3x\mathrm{d}^3y'\langle\hat{\psi}^+_\alpha(\underline{x}',t')\hat{\psi}^+_\gamma(\underline{y}',t)V_{\alpha\gamma,\beta'\gamma'}(\underline{x},\underline{y}')\hat{\psi}_{\gamma'}(\underline{y}',t)\hat{\psi}_{\beta'}(\underline{x},t)\rangle\Bigg|_{\substack{\underline{x}'=\underline{x}\\t'=t^+}}\end{aligned}\tag{2.4.27}$$

故

$$\langle\hat{V}\rangle=\pm\frac{1}{2}\mathrm{i}\int\mathrm{d}^3x\left[\left(\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\boldsymbol{\nabla}^2_x}{2m}\right)\mathrm{tr}G(\underline{x},t;\underline{x}',t^+)\right]_{\underline{x}'=\underline{x}}\tag{2.4.28}$$

由此得到**基态能量公式**:

$$E_0=\langle\hat{H}\rangle=\langle\hat{T}+\hat{V}\rangle=\pm\frac{1}{2}\mathrm{i}\int\mathrm{d}^3x\left[\left(\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}-\frac{\boldsymbol{\nabla}^2_x}{2m}\right)\mathrm{tr}G(\underline{x},t;\underline{x}',t^+)\right]_{\underline{x}'=\underline{x}}\tag{2.4.29a}$$

显然对于平移不变体系, 则有

$$E_0=\pm\frac{1}{2}\mathrm{i}V\int\frac{\mathrm{d}^4p}{(2\pi)^4}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p^0\eta}\left(\frac{\underline{p}^2}{2m}+p^0\right)\mathrm{tr}G(\underline{p},p^0)\tag{2.4.29b}$$

$$N=\int\mathrm{d}^3x\langle\hat{n}(\underline{x})\rangle=\pm\mathrm{i}V\int\frac{\mathrm{d}^4p}{(2\pi)^4}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p^0\eta}\mathrm{tr}G(\underline{p},p^0)\tag{2.4.30}$$

其中, V 是体积; $\eta\to0^+$, 它能在上述积分中确定出复 p^0 平面中恰当的积分回路. 但式 (2.4.29a) 和式 (2.4.29b) 的形式与后面要介绍的微扰展开没有直接的联系, 除非将 $\dfrac{\underline{p}^2}{2m}+p^0$ 化成 $p^0-\dfrac{\underline{p}^2}{2m}$ 的形式. 为此考虑如下一个连续参数化的哈密顿集合

$\hat{H}(\lambda)$:

$$\hat{H}(\lambda) \equiv \hat{T} + \lambda\hat{V} \tag{2.4.31}$$

显然, $\hat{H}(1) = \hat{H}$, $\hat{H}(0) = \hat{T}$. $\hat{H}(\lambda)$ 的本征值为 $E_0(\lambda)$, 归一化的本征函数为 $|\psi_0^{(\mathrm{H})}(\lambda)\rangle$:

$$\hat{H}(\lambda)|\psi_0^{(\mathrm{H})}(\lambda)\rangle = E_0(\lambda)|\psi_0^{(\mathrm{H})}(\lambda)\rangle$$

故

$$E_0(\lambda) = \langle\psi_0^{(\mathrm{H})}(\lambda)|\hat{H}(\lambda)|\psi_0^{(\mathrm{H})}(\lambda)\rangle$$

两端对参量 λ 求导, 得

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}E_0(\lambda) = &\left\langle \frac{\mathrm{d}\psi_0^{(\mathrm{H})}(\lambda)}{\mathrm{d}\lambda}\right| \hat{H}(\lambda)|\psi_0^{(\mathrm{H})}(\lambda)\rangle + \langle\psi_0^{(\mathrm{H})}(\lambda)|\hat{H}(\lambda)\left|\frac{\mathrm{d}\psi_0^{(\mathrm{H})}(\lambda)}{\mathrm{d}\lambda}\right\rangle \\ &+ \langle\psi_0^{(\mathrm{H})}(\lambda)|\frac{\mathrm{d}\hat{H}(\lambda)}{\mathrm{d}\lambda}|\psi_0^{(\mathrm{H})}(\lambda)\rangle \\ =&E_0(\lambda)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}(\lambda)|\psi_0^{(\mathrm{H})}(\lambda)\rangle + \langle\psi_0^{(\mathrm{H})}(\lambda)|\hat{V}|\psi_0^{(\mathrm{H})}(\lambda)\rangle \\ =&\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}(\lambda)|\hat{V}|\psi_0^{(\mathrm{H})}(\lambda)\rangle\end{aligned} \tag{2.4.32}$$

这是熟知的费曼–海尔曼定理. 将上式对 λ 从 0 到 1 积分, 并注意到 $E_0(0) = W_0$ 是无相互作用体系的基态能量, 而 $E_0(1) = E_0$, 得

$$E_0 - W_0 = \int_0^1 \frac{\mathrm{d}\lambda}{\lambda}\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}(\lambda)|\lambda\hat{V}|\psi_0^{(\mathrm{H})}(\lambda)\rangle \tag{2.4.33}$$

由式 (2.4.10) 可知

$$E_0 - W_0 = \pm\frac{1}{2}\mathrm{i}\int_0^1 \frac{\mathrm{d}\lambda}{\lambda}\int \mathrm{d}^3x \left[\left(\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\boldsymbol{\nabla}_x^2}{2m}\right)\mathrm{tr}G^{\lambda}(\underline{x},t;\underline{x}',t^+)\right]_{\underline{x}'=\underline{x}} \tag{2.4.34}$$

对于平移不变系统, 则有

$$E_0 - W_0 = \pm\frac{1}{2}\mathrm{i}V\int_0^1 \frac{\mathrm{d}\lambda}{\lambda}\int \frac{\mathrm{d}^4p}{(2\pi)^4}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p^0\eta}\left(p^0 - \frac{\underline{p}^2}{2m}\right)\mathrm{tr}G^{\lambda}(\underline{p},p^0) \tag{2.4.35}$$

三、解析性质

可以从一般原理出发导出单体格林函数的一些重要的解析性质, 这些性质与相互作用的具体形式无关. 因而它们也可以作为各种近似方法的判据. 为此我们在格林函数定义式 (2.4.1) 中插入海森伯绘景中的一组能量本征态的完全集.

$$\mathrm{i}G_{\alpha\beta}(x,x') = \langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|\left(\theta(t-t')\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}_\beta^+(x') \pm \theta(t'-t)\hat{\psi}_\beta^+(x')\hat{\psi}_\alpha(x)\right)|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle$$

$$= \sum_n \theta(t-t')\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|\hat{\psi}_\alpha(x)|\psi_n^{N+1}\rangle\langle\psi_n^{N+1}|\hat{\psi}_\beta^+(x')|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle$$
$$\pm \sum_n \theta(t'-t)\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|\hat{\psi}_\beta^+(x')|\psi_n^{N-1}\rangle\langle\psi_n^{N-1}|\hat{\psi}_\alpha(x)|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle \tag{2.4.36}$$

其中, 上标 $N+1$ 及 $N-1$ 分别代表 $N+1$ 粒子体系及 $N-1$ 粒子体系的状态; $|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle$ 是 N 粒子体系的基态. 利用 $\hat{\psi}_\alpha(\underline{x},t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t}\hat{\psi}(\underline{x})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t}$, 很易得知有

$$\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|\hat{\psi}_\alpha(\underline{x},t)|\psi_n^{N+1}\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_n^{N+1}-E_0)t}\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|\hat{\psi}_\alpha(\underline{x})|\psi_n^{N+1}\rangle \tag{2.4.37}$$

$$\langle\psi_n^{N+1}|\hat{\psi}_\beta^+(\underline{x}',t)|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_n^{N+1}-E_0)t'}\langle\psi_n^{N+1}|\hat{\psi}_\beta^+(\underline{x}')|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle \tag{2.4.38}$$

以及关于 $N-1$ 粒子体系的粒子态的类似关系. 故

$$\begin{aligned}\mathrm{i}G_{\alpha\beta}(x,x') = &\sum_n \theta(t-t')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_n^{N+1}-E_0)(t-t')}\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|\hat{\psi}_\alpha(\underline{x})|\psi_n^{N+1}\rangle\langle\psi_n^{N+1}|\hat{\psi}_\beta^+(\underline{x}')|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle\\ &\pm\sum_n \theta(t'-t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_n^{N-1}-E_0)(t'-t)}\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|\hat{\psi}_\beta^+(\underline{x}')|\psi_n^{N-1}\rangle\langle\psi_n^{N-1}|\hat{\psi}_\alpha(\underline{x})|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle\end{aligned} \tag{2.4.39}$$

注意到下面的恒等式：

$$\pm\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon t}\theta(\pm t) \equiv \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\omega\frac{\mathrm{i}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}}{\omega-\varepsilon\pm\mathrm{i}0^+} \tag{2.4.40}$$

它的逆变换为

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon t}\theta(\pm t) = \pm\frac{\mathrm{i}}{\omega-\varepsilon\pm\mathrm{i}0^+} \tag{2.4.41}$$

由此可知式 (2.4.21) 的傅里叶频率变换是

$$\begin{aligned}G_{\alpha\beta}(\underline{x},\underline{x}';\omega) &\equiv \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega(t-t')}G_{\alpha\beta}(\underline{x},t;\underline{x}',t')\\ &= \sum_n \frac{\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|\hat{\psi}_\alpha(\underline{x})|\psi_n^{N+1}\rangle\langle\psi_n^{N+1}|\hat{\psi}_\beta^+(\underline{x}')|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle}{\omega-(E_n^{N+1}-E_0)+\mathrm{i}0^+}\\ &\quad\mp\sum_n \frac{\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|\hat{\psi}_\beta^+(\underline{x}')|\psi_n^{N-1}\rangle\langle\psi_n^{N-1}|\hat{\psi}_\alpha(\underline{x})|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle}{\omega+(E_n^{N-1}-E_0)-\mathrm{i}0^+}\end{aligned} \tag{2.4.42}$$

由上式可以看出频率表象中的格林函数的解析行为：对 $N+1$ 粒子体系的每个本征态 $|\psi_n^{N+1}\rangle$, 在 ω 复平面的下半平面上都有极点 $(E_n^{N+1}-E_0)-\mathrm{i}0^+$, 而对于 $N-1$ 粒子体系的每个本征态 $|\psi_n^{N-1}\rangle$, 在上半平面都有极点 $(E_0-E_n^{N+1})+\mathrm{i}0^+$, 如图 2.4.1 所示.

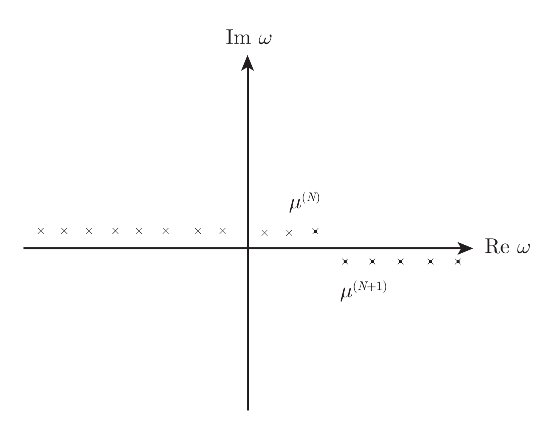


图 2.4.1　频率表象中的格林函数的极点分布

图 2.4.1 中, $\mu^{(N+1)} \equiv E_0^{N+1} - E_0$, $\mu^{(N)} \equiv E_0 - E_0^{N-1}$.

对于无限体系, 由于在大 N 极限下, $\mu^{(N+1)} = \mu^{(N)} = \mu$, 此时相对于化学势 μ 来度量所有能量是很方便的. 所以可定义

$$E_n^{N+1} - E_0 = E_n^{N+1} - E_0^{N+1} + E_0^{N+1} - E_0 \equiv \varepsilon_n^{N+1} + \mu \tag{2.4.43}$$

$$E_n^{N-1} - E_0 = E_n^{N-1} - E_0^{N-1} + E_0^{N-1} - E_0 \equiv \varepsilon_n^{N-1} - \mu \tag{2.4.44}$$

其中, ε_n^{N+1} 是 $N+1$ 粒子体系中的粒子的激发能; ε_n^{N-1} 是 $N-1$ 粒子体系中的粒子的激发能.

对于有空间平移不变性的无限体系, 还可作进一步的傅里叶动量变换. 可以证明 (参见**附录 2B**) 有

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta}(\underline{k};\omega) &\equiv \int \mathrm{d}^3(x-x')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\underline{k}\cdot(\underline{x}-\underline{x}')}G_{\alpha\beta}(\underline{x},\underline{x}';\omega) \\ &= \sum_n \left[\frac{\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|\hat{c}_{\underline{k}\alpha}|\psi_{n\underline{k}}^{N+1}\rangle\langle\psi_{n\underline{k}}^{N+1}|\hat{c}_{\underline{k}\beta}^+|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle}{\omega-(\mu+\varepsilon_{n\underline{k}}^{N+1})+\mathrm{i}0^+} \right. \\ &\quad \left. \mp \frac{\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|\hat{c}_{\underline{k}\beta}^+|\psi_{n,-\underline{k}}^{N-1}\rangle\langle\psi_{n,-\underline{k}}^{N-1}|\hat{c}_{\underline{k}\alpha}|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle}{\omega-(\mu-\varepsilon_{n,-\underline{k}}^{N-1})-\mathrm{i}0^+} \right] \end{aligned} \tag{2.4.45}$$

其中, $|\psi_{n\underline{k}}^{N+1}\rangle$ 是动量为 $\underline{k}$ 的动量本征态; $\hat{c}_{\underline{k}\alpha}$ 是消灭一个动量 $\underline{k}$ 自旋 α 的粒子的消灭算符等. 若相互作用与自旋无关且无外磁场, 则

$$G_{\alpha\beta}(\underline{k};\omega) = G(\underline{k};\omega)\delta_{\alpha\beta} \tag{2.4.46}$$

$$G(\underline{k};\omega) = \sum_n \left[\frac{|\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|\hat{c}_{\underline{k}}|\psi_{n\underline{k}}^{N+1}\rangle|^2}{\omega-(\mu+\varepsilon_{n\underline{k}}^{N+1})+\mathrm{i}0^+} \mp \frac{|\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|\hat{c}_{\underline{k}}^+|\psi_{n,-\underline{k}}^{N-1}\rangle|^2}{\omega-(\mu-\varepsilon_{n,-\underline{k}}^{N-1})-\mathrm{i}0^+} \right] \tag{2.4.47}$$

显然 $G(\underline{k};\omega)$ 是 ω 的半纯函数, 即除了孤立极点外它在 ω 的全复平面内是单值正则的. 但是对于大量粒子的体系, 它的极点变得非常稠密, 仅它的平均才能度量. 因此引进如下谱权重函数(简称**谱函数**) 是有用的:

$$\rho^+(\underline{k};\omega)=\sum_n|\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|\hat{c}_{\underline{k}}|\psi_{n\underline{k}}^{N+1}\rangle|^2\delta(\varepsilon_{n\underline{k}}^{N+1}-\omega) \tag{2.4.48}$$

$$\rho^-(\underline{k};\omega)=\sum_n|\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|\hat{c}_{\underline{k}}^+|\psi_{n,-\underline{k}}^{N-1}\rangle|^2\delta(\varepsilon_{n\underline{k}}^{N-1}-\omega) \tag{2.4.49}$$

以及

$$\rho(\underline{k};\omega)=\theta(\omega)\rho^+(\underline{k};\omega)\mp\theta(-\omega)\rho^-(\underline{k};-\omega) \tag{2.4.50}$$

借助于这些权重函数可以将格林函数表达成

$$G(\underline{k};\omega)=\int_0^\infty \mathrm{d}\omega'\left[\frac{\rho^+(\underline{k};\omega')}{\omega-\mu-\omega'+\mathrm{i}0^+}\mp\frac{\rho^-(\underline{k};\omega')}{\omega-\mu+\omega'-\mathrm{i}0^+}\right] \tag{2.4.51}$$

现在, 无限体积的极限使复 ω 平面上分立的极点变成了一条连续的割线. 将格林函数用谱函数表示, 场论中称为 **Lehmann 表示**.

利用公式 $\dfrac{1}{\omega\pm\mathrm{i}0^+}=P\dfrac{1}{\omega}\mp\mathrm{i}\pi\delta(\omega)$, 其中, P 代表主部, 可知

$$\begin{aligned}\mathrm{Im}G(\underline{k};\omega)&=\begin{cases}-\pi\rho^+(\underline{k};\omega-\mu) & (\omega>\mu)\\ \mp\pi\rho^-(\underline{k};\mu-\omega) & (\mu>\omega)\end{cases}\\ &=-\pi\rho(\underline{k};\omega-\mu)\mathrm{sgn}(\omega-\mu)\end{aligned} \tag{2.4.52}$$

$$\mathrm{Re}G(\underline{k};\omega)=P\int_{-\infty}^\infty \mathrm{d}\omega'\frac{\rho(\underline{k};\omega')}{\omega-\mu-\omega'} \tag{2.4.53}$$

故格林函数满足**色散关系**:

$$\mathrm{Re}G(\underline{k};\omega)=-\frac{1}{\pi}P\int_{-\infty}^\infty \mathrm{d}\omega'\frac{\mathrm{Im}G(\underline{k};\omega')}{\omega-\omega'}\mathrm{sgn}(\omega'-\mu) \tag{2.4.54}$$

由产生和消灭算符的对易关系可以给出**谱函数的求和法则**:

$$\begin{aligned}1&=\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|[\hat{c}_{\underline{k}},\hat{c}_{\underline{k}}^+]_\mp|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle\\ &=\sum_n|\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|\hat{c}_{\underline{k}}|\psi_{n\underline{k}}^{N+1}\rangle|^2\mp\sum_n|\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|\hat{c}_{\underline{k}}^+|\psi_{n,-\underline{k}}^{N-1}\rangle|^2\\ &=\int_0^\infty \mathrm{d}\omega[\rho^+(\underline{k};\omega)\mp\rho^-(\underline{k};\omega)]\end{aligned}$$

故有

$$\int_0^\infty \mathrm{d}\omega\rho(\underline{k};\omega)=1 \tag{2.4.55}$$

由式 (2.4.51) 和式 (2.4.55) 可知, 当 $|\omega| \to \infty$ 时, 格林函数有如下的**高频行为**:

$$G(\underline{k};\omega) \to \frac{1}{\omega}\int_0^{\infty} \mathrm{d}\omega'[\rho^+(\underline{k};\omega') \mp \rho^-(\underline{k};\omega')] = \frac{1}{\omega} \tag{2.4.56}$$

由前面的讨论可知, 格林函数既不是上半平面的解析函数, 也不是下半平面的解析函数, 而对上半平面或下半平面的解析函数作回路积分又往往比较方便. 所以我们引入具有这种性质的**推迟和超前格林函数**(原来的格林函数常称为 “**因果格林函数**”) 并分别用 r, a 标记. 它们的定义是

$$\mathrm{i}G^{\mathrm{r}}_{\alpha\beta}(x,x') = \theta(t-t')\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|[\hat{\psi}_\alpha(x),\hat{\psi}^+_\beta(x')]_\mp|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle \tag{2.4.57}$$

$$\mathrm{i}G^{\mathrm{a}}_{\alpha\beta}(x,x') = -\theta(t'-t)\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|[\hat{\psi}_\alpha(x),\hat{\psi}^+_\beta(x')]_\mp|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle \tag{2.4.58}$$

它们的分析和因果格林函数的分析相同, 所以仅列出有关的结果.

(1)

$$G^{\mathrm{r,a}}_{\alpha\beta}(\underline{k};\omega) = \sum_n \left[\frac{\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|\hat{c}_{\underline{k}\alpha}|\psi_{n\underline{k}}^{N+1}\rangle\langle\psi_{n\underline{k}}^{N+1}|\hat{c}^+_{\underline{k}\beta}|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle}{\omega-(\mu+\varepsilon_{n\underline{k}}^{N+1})\pm\mathrm{i}0^+} \mp \frac{\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|\hat{c}^+_{\underline{k}\beta}|\psi_{n,-\underline{k}}^{N-1}\rangle\langle\psi_{n,-\underline{k}}^{N-1}|\hat{c}_{\underline{k}\alpha}|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle}{\omega-(\mu-\varepsilon_{n,-\underline{k}}^{N-1})\pm\mathrm{i}0^+}\right] \tag{2.4.59}$$

由此可知它们也是半纯函数, 而且推迟格林函数只是上半平面的解析函数, 超前格林函数只是下半平面的解析函数.

(2)

$$[G^{\mathrm{r}}_{\alpha\beta}(\underline{k};\omega)]^* = G^{\mathrm{a}}_{\alpha\beta}(\underline{k};\omega) \tag{2.4.60}$$

(3)

$$G_{\alpha\beta}(\underline{k};\omega) = G^{\mathrm{r}}_{\alpha\beta}(\underline{k};\omega)\theta(\omega-\mu) + G^{\mathrm{a}}_{\alpha\beta}(\underline{k};\omega)\theta(\mu-\omega) \tag{2.4.61}$$

(4)

$$G^{\mathrm{r,a}}(\underline{k};\omega) = \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\omega'\frac{\rho(\underline{k};\omega')}{\omega-\mu-\omega'\pm\mathrm{i}0^+} \tag{2.4.62}$$

(5)

$$\rho(\underline{k};\omega-\mu) = \mp\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}G^{\mathrm{r,a}}(\underline{k};\omega) \tag{2.4.63}$$

(6) 当 $|\omega| \to \infty$ 时, $G^{\mathrm{r,a}}(\omega;\underline{k}) \to \dfrac{1}{\omega}$.

一旦知道了谱函数, 就可求得所有格林函数.

第五节　Wick 定理

在以后提取物理信息的过程中, 我们经常要计算算符的编时乘积的平均值 (包括格林函数), 但编时乘积的平均值不能让我们直观快速地给出结果, 相反, 下面要引入的算符 “正规乘积” 的平均值往往能直接读出. 因此如何把算符的编时乘积转化成正规乘积就是很重要的事, 而这正是 Wick 定理要告诉我们的.

一、正规次序乘积 (或简称正规乘积)

符号: $\hat{A}_1\hat{A}_2\cdots\hat{A}_n$: 表示算符 $\hat{A}_1,\hat{A}_2,\cdots,\hat{A}_n$ 的正规乘积, 它定义为算符 $\hat{A}_i(i=1,2,\cdots,n)$ 如下方式重新排列的乘积, 使得所有产生算符在所有消灭算符的左边. 若 $\hat{A}_i$ 中有费米子算符, 将出现因子 $(-1)^p$, 其中, p 是算符重排时费米子算符之间的对换次数.

例: 设 $\hat{a}$ 是玻色子算符, $\hat{b}$ 是费米子算符, 则

$$:\hat{a}_{k_1}\hat{a}^+_{k_2}\hat{a}_{k_3}\hat{a}^+_{k_4}:=\hat{a}^+_{k_2}\hat{a}^+_{k_4}\hat{a}_{k_1}\hat{a}_{k_3}$$

$$:\hat{a}_{k_1}\hat{a}^+_{k_2}\hat{b}_{p_1}\hat{b}^+_{p_2}:=-\hat{a}^+_{k_2}\hat{b}^+_{p_2}\hat{a}_{k_1}\hat{b}_{p_1}$$

正规次序的优点在于, 一旦我们把算符乘积化成正规次序后, 就能立刻读出它的矩阵元. 例如, 对于 $:\hat{a}^+_{k'_1}\hat{a}^+_{k'_2}\cdots\hat{a}^+_{k'_m}\hat{a}_{k_1}\hat{a}_{k_2}\cdots\hat{a}_{k_n}:$, 我们一眼就看出它的唯一非零矩阵元是在左矢 $\langle k'_1k'_2\cdots k'_m|$ 和右矢 $|k_1k_2\cdots k_n\rangle$ 之间.

二、场论模型

作为下面要引入的理论形式体系所需要的一个简单例子, 我们考虑如下场论模型, 它描述了仅有两两瞬时相互作用势的非相对论性电子体系. 根据第一章第三节的讨论, 并考虑自旋指标, 则有

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}_{\text{int}} \tag{2.5.1}$$

$$\hat{H}_0=\int \mathrm{d}^3x\hat{\psi}^+_\alpha(\underline{x},t)\frac{-1}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2\hat{\psi}_\alpha(\underline{x},t) \tag{2.5.2}$$

$$\hat{H}_{\text{int}}(t)=\frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3x\mathrm{d}^3y\hat{\psi}^+_\alpha(\underline{x},t)\hat{\psi}^+_\beta(\underline{y},t)V_{\alpha\beta,\alpha'\beta'}(\underline{x},\underline{y})\hat{\psi}_{\beta'}(\underline{y},t)\hat{\psi}_{\alpha'}(\underline{x},t) \tag{2.5.3}$$

其中, $\alpha,\alpha',\beta,\beta'$ 是自旋指标, 重复的自旋指标自动求和. 在非相对论情形, 旋量场算符 $\hat{\psi},\hat{\psi}^+$ 仅含两个非平凡分量. 动能与自旋无关, 但势能可以与自旋有关. $\hat{H}_{\text{int}}$ 中的场算符已按无粒子真空中定义的自由粒子的产生算符和消灭算符排成了正规次序.

在相互作用绘景中, 场算符满足自由场方程. 利用自由场方程的平面波解可给出场算符的如下展开式 (参见式 (1.4.71)):

$$\hat{\psi}_{\alpha\mathrm{I}}(\underline{x},t)=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\underline{p}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(Et-\underline{p}\cdot\underline{x})}[\hat{c}_{\underline{p}\alpha}\theta(|\underline{p}|-p_{\mathrm{F}})+\hat{d}^+_{\underline{p}\alpha}\theta(p_{\mathrm{F}}-|\underline{p}|)] \tag{2.5.4}$$

其中, $\hat{c}_{\underline{p}\alpha}$ 和 $\hat{d}^+_{\underline{p}\alpha}$ 分别是电子的消灭算符和空穴的产生算符; $p_{\mathrm{F}}\equiv|\underline{p}_{\mathrm{F}}|$ 是费米动量的绝对值; 由上式的厄米共轭可得 $\hat{\psi}^+_{\alpha\mathrm{I}}(x)$ 的相应表达式. 本节以下内容以及下一节均在相互作用绘景中加以讨论, 为书写方便我们略去角标 I.

三、自由传播子

可以将编时乘积化成正规乘积的形式.

(1) 显然单个场变量的编时乘积就是正规乘积, 即

$$T\hat{\psi}(x) =: \hat{\psi}(x) : \tag{2.5.5}$$

(2)
$$T\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}^+_\beta(x') =: \hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}^+_\beta(x') : + \overleftarrow{\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}^+_\beta(x')} \tag{2.5.6}$$

其中, 左边第二项称为场的**收缩**项, 也叫**自由传播子**(有时就简称为**传播子**). 我们以外势场 V_1 为零的电子体系为例 (参见式 (1.3.43) 和式 (1.3.44), 可以证明此时

$$\begin{aligned}\overleftarrow{\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}^+_\beta(x')} \equiv T\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}^+_\beta(x') - :\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}^+_\beta(x'):\\ = \delta_{\alpha\beta}\frac{1}{V}\sum_{\underline{p}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}[E_p(t-t')-\underline{p}\cdot(\underline{x}-\underline{x}')]}[\theta(|\underline{p}|-p_\mathrm{F})\theta(t-t')\\ -\theta(p_\mathrm{F}-|\underline{p}|)\theta(t'-t)]\end{aligned} \tag{2.5.7}$$

其中, $E_p = \underline{p}^2/(2m)$; $p_\mathrm{F} = \sqrt{2m\varepsilon_\mathrm{F}}$ 为**费米动量**. 式 (2.5.7) 右边括号中的第二项对应了空穴部分, 可以把空穴解释成**逆时传播**的粒子.

证明 当 $t > t'$ 时, 有

$$\begin{aligned}T\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}^+_\beta(x') =& \hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}^+_\beta(x')\\ =& \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\underline{p}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_pt-\underline{p}\cdot\underline{x})}[\hat{a}_{\underline{p}\alpha}\theta(|\underline{p}|-p_\mathrm{F}) + \hat{b}^+_\alpha\theta(p_\mathrm{F}-|\underline{p}|)]\\ & \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\underline{p}'} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_{p'}t'-\underline{p}'\cdot\underline{x}')}[\hat{a}^+_{\underline{p}'\beta}\theta(|\underline{p}'|-p_\mathrm{F}) + \hat{b}_{\underline{p}'\beta}\theta(p_\mathrm{F}-|\underline{p}'|)]\\ =& \frac{1}{V}\sum_{\underline{p},\underline{p}'} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_pt-\underline{p}\cdot\underline{x})}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_{p'}t'-\underline{p}'\cdot\underline{x}')}\cdot\Big[\Big(\delta_{\alpha\beta}\delta_{\underline{p},\underline{p}'} - \hat{a}^+_{\underline{p}'\beta}\hat{a}_{\underline{p}\alpha}\Big)\\ & \cdot\theta(|\underline{p}|-p_\mathrm{F})\theta(|\underline{p}'|-p_\mathrm{F}) + \hat{a}_{\underline{p}\alpha}\hat{b}_{\underline{p}'\beta}\theta(|\underline{p}|-p_\mathrm{F})\theta(p_\mathrm{F}-|\underline{p}'|)\\ & + \hat{b}^+_{\underline{p}\alpha}\hat{a}^+_{\underline{p}\beta}\theta(p_\mathrm{F}-|\underline{p}|)\theta(|\underline{p}'|-p_\mathrm{F}) + \hat{b}^+_{\underline{p}\alpha}\hat{b}_{\underline{p}'\beta}\theta(p_\mathrm{F}-|\underline{p}|)\theta(p_\mathrm{F}-|\underline{p}'|)\Big]\\ =& \delta_{\alpha\beta}\frac{1}{V}\sum_{\underline{p}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}[E_p(t-t')-\underline{p}\cdot(\underline{x}-\underline{x}')]}\theta(|\underline{p}|-p_\mathrm{F}) + :\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}^+_\beta(x'):\end{aligned}$$

故当 $t > t'$ 时, 式 (2.5.6) 和式 (2.5.7) 成立. 类似可证明当 $t < t'$ 时, 它们也成立.

利用消灭算符作用于基态为零以及收缩只是一个函数的事实, 可以看出自由传播子实际上就是**无相互作用格林函数**. 这是因为

$$
\begin{aligned}
\overleftarrow{\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}^+_\beta}(x') &\equiv T\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}^+_\beta(x') - :\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}^+_\beta(x'): \\
&= \langle\varphi_0|[T\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}^+_\beta(x') - :\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}^+_\beta(x'):]|\varphi_0\rangle \\
&= \langle\varphi_0|T\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}^+_\beta(x')|\varphi_0\rangle \equiv \mathrm{i}G^0_{\alpha\beta}(x,x')
\end{aligned}
$$

这里的求平均可以理解成在海森伯绘景中, 也可以理解成在相互作用绘景中, 因为无相互作用时, 这两种绘景是相同的. $|\varphi_0\rangle$ 是自由粒子体系的基态.

进一步, 利用残数定理, 可得到频率动量表象中的传播子, 首先有

$$
\mathrm{i}G^0_{\alpha\beta}(x,x') = \frac{1}{V}\sum_{\underline{p}}\int\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p\cdot(x-x')}\frac{\mathrm{i}\delta_{\alpha\beta}}{\omega-\varepsilon^0_p+\mathrm{i}0^+\mathrm{sgn}(|\underline{p}|-p_{\mathrm{F}})} \tag{2.5.8}
$$

其中, $\varepsilon^0_p \equiv \dfrac{p^2}{2m}$. 若过渡到连续动量情形, 则有

$$
\mathrm{i}G^0_{\alpha\beta}(x,x') = \int\frac{\mathrm{d}^4p}{(2\pi)^4}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p\cdot(x-x')}\frac{\mathrm{i}\delta_{\alpha\beta}}{\omega-\varepsilon^0_p+\mathrm{i}0^+\mathrm{sgn}(|\underline{p}|-p_{\mathrm{F}})} \tag{2.5.9}
$$

其中, 若 $|\underline{p}| > p_{\mathrm{F}}$, 符号函数 $\mathrm{sgn}(|\underline{p}|-p_{\mathrm{F}}) = 1$；若 $|\underline{p}| < p_{\mathrm{F}}$, $\mathrm{sgn}(|\underline{p}|-p_{\mathrm{F}}) = -1$.

证明　先考虑 $t > t'$ 及 $|\underline{p}| > \underline{p}_{\mathrm{F}}$ 情形, 此时式 (2.5.8) 中被积函数有极点：$p_0 = \varepsilon^0_p - \mathrm{i}0^+$. 我们选取下半平面的积分围道, 如图 2.5.1 所示.

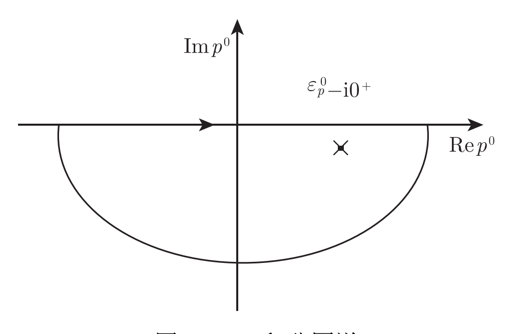


图 2.5.1　积分围道

所以式 (2.5.8) 中的积分为

$$
\begin{aligned}
&\frac{1}{V}\sum_{\underline{p}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{p}\cdot(\underline{x}-\underline{x}')}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t')}\frac{\mathrm{i}\delta_{\alpha\beta}}{\omega-\varepsilon^0_p+\mathrm{i}0^+} \\
=&\frac{1}{V}\sum_{\underline{p}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{p}\cdot(\underline{x}-\underline{x}')}\frac{1}{2\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon^0_p(t-t')}(-2\pi\mathrm{i})\mathrm{i}\delta_{\alpha\beta}
\end{aligned}
$$

它显然与式 (2.5.7) 相符合. 类似可证明在其他情形也正确.

显然根据傅里叶变换定义可知, $\mathrm{i}G^0_{\alpha\beta}(x,x')$ 的傅里叶分量为

$$\mathrm{i}G^0_{\alpha\beta}(\underline{p},\omega)=\frac{\mathrm{i}\delta_{\alpha\beta}}{\omega-\varepsilon^0_p+\mathrm{i}0^+\mathrm{sgn}(|\underline{p}|-p_{\mathrm{F}})} \tag{2.5.10}$$

它就是频率–动量表象 (或简称为 (四维) 动量表象) 中的电子传播子.

(3) 还可以证明有

$$T\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}_\beta(x)=:\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}_\beta(x): \tag{2.5.11}$$

$$T\hat{\psi}^+_\alpha(x)\hat{\psi}^+_\beta(x)=:\hat{\psi}^+_\alpha(x)\hat{\psi}^+_\beta(x): \tag{2.5.12}$$

四、Wick 定理

Wick 定理可表述为: 自由场算符的任何编时乘积 $T(\hat{A}_1\hat{A}_2\cdots\hat{A}_n)$ 可以表达成所有可能收缩 (包括不收缩) 的正规乘积的和.

例如:

$$\begin{aligned}T(\hat{\psi}_1\hat{\psi}^+_2\hat{\psi}_3\hat{\psi}^+_4)=&:\hat{\psi}_1\hat{\psi}^+_2\hat{\psi}_3\hat{\psi}^+_4:+:\overbracket{\hat{\psi}_1\hat{\psi}^+_2}\hat{\psi}_3\hat{\psi}^+_4:+:\overbracket{\hat{\psi}_1\hat{\psi}^+_2\hat{\psi}_3\hat{\psi}^+_4}:\\&+:\hat{\psi}_1\overbracket{\hat{\psi}^+_2\hat{\psi}_3}\hat{\psi}^+_4:+:\hat{\psi}_1\hat{\psi}^+_2\overbracket{\hat{\psi}_3\hat{\psi}^+_4}:+:\overbracket{\hat{\psi}_1\hat{\psi}^+_2}\,\overbracket{\hat{\psi}_3\hat{\psi}^+_4}:+:\overbracket{\hat{\psi}_1\underbracket{\hat{\psi}^+_2\hat{\psi}_3}\hat{\psi}^+_4}:\\=&:\hat{\psi}_1\hat{\psi}^+_2\hat{\psi}_3\hat{\psi}^+_4:+\mathrm{i}G^0(1,2):\hat{\psi}_3\hat{\psi}^+_4:+\mathrm{i}G^0(1,4):\hat{\psi}^+_2\hat{\psi}_3:\\&+(-\mathrm{i})G^0(3,2):\hat{\psi}_1\hat{\psi}^+_4:+\mathrm{i}G^0(3,4):\hat{\psi}_1\hat{\psi}^+_2:+\mathrm{i}G^0(1,2)\mathrm{i}G^0(3,4)\\&+\mathrm{i}G^0(1,4)(-\mathrm{i})G^0(3,2)\end{aligned}$$

上例中, 场算符 $\hat{\psi}_1$ 代表 $\hat{\psi}(x_1)$, 自由传播子 $\mathrm{i}G^0(1,2)$ 代表 $\mathrm{i}G^0(x_1,x_2)$ 等. 注意: 可能的不为零的收缩只能是同一种粒子的产生算符和消灭算符之间的收缩. 除了上述的 Wick 定理外还有应用上更为重要的所谓的关于平均值的广义 Wick 定理. 由于消灭算符作用到基态得零, 自由场算符的任何编时乘积 $T(\hat{A}_1\hat{A}_2\cdots\hat{A}_n)$ 的基态平均值只能由那些全部算符都**成对收缩**了的项组成, 这一重要结论可称为**关于平均值的广义 Wick 定理**.

例如, 上例的平均值就为

$$\begin{aligned}\langle\varphi_0|T(\hat{\psi}_1\hat{\psi}^+_2\hat{\psi}_3\hat{\psi}^+_4)|\varphi_0\rangle&=\overbracket{\hat{\psi}_1\hat{\psi}^+_2}\,\overbracket{\hat{\psi}_3\hat{\psi}^+_4}+\overbracket{\hat{\psi}_1\underbracket{\hat{\psi}^+_2\hat{\psi}_3}\hat{\psi}^+_4}\\&=\mathrm{i}G^0(1,2)\mathrm{i}G^0(3,4)+\mathrm{i}G^0(1,4)(-\mathrm{i})G^0(3,2)\end{aligned} \tag{2.5.13}$$

这里我们不打算在算符途径中给出 Wick 定理的一般性证明, 这种证明多少有些冗长乏味. 相反, 在等价的量子场论的路径积分途径中, Wick 定理的一般性证明却相当直观简洁 (参见第七章). 但是这里我们却要在宏观极限情形下对关于平均值的广义 Wick 定理给出一种富有启发性的证明. 宏观极限即取体积 $V \to \infty$, 或者等价地在给定体系密度下, 取粒子数 $N \to \infty$. 显然宏观极限情形是我们最感兴趣的情形.

由式 (2.4.9) 和式 (2.4.10) 知

$$\langle\varphi_0|\hat{\psi}_1\hat{\psi}_2^+\hat{\psi}_3\hat{\psi}_4^+|\varphi_0\rangle = \frac{1}{V^2}\sum_{\underline{p}_1\underline{p}_2\underline{p}_3\underline{p}_4}\langle\varphi_0|\hat{c}_{\underline{p}_1}\hat{c}_{\underline{p}_2}^+\hat{c}_{\underline{p}_3}\hat{c}_{\underline{p}_4}^+|\varphi_0\rangle\exp(\cdots) \tag{2.5.14}$$

其中, $\exp(\cdots)$ 为未详细写出的指数函数. 显然动量只能是成对地相等, 否则平均值为零. 例如, 设 $\underline{p}_1 = \underline{p}_4, \underline{p}_2 = \underline{p}_3$ 来进一步分析, 此时式 (2.5.14) 可表达成形式为

$$\frac{1}{V^2}\sum_{\underline{p}_1\underline{p}_2}\langle\varphi_0|\hat{c}_{\underline{p}_1}\hat{c}_{\underline{p}_2}^+|\varphi_0\rangle\langle\varphi_0|\hat{c}_{\underline{p}_2}\hat{c}_{\underline{p}_1}^+|\varphi_0\rangle\exp(\cdots) \tag{2.5.15}$$

的和, 当 $V \to \infty$ 时, 由于 $\dfrac{1}{V^2}\sum\limits_{\underline{p}_1\underline{p}_2} \to \displaystyle\int\frac{\mathrm{d}^3p_1\mathrm{d}^3p_2}{(2\pi)^6}$, $1/V^2$ 的消去使得式 (2.5.15) 的值为有限值. 在式 (2.5.14) 中还有一种特殊情形不为零, 即 $\underline{p}_1 = \underline{p}_2 = \underline{p}_3 = \underline{p}_4$. 但此时它形成这样的和：

$$\langle\varphi_0|\hat{\psi}_1\hat{\psi}_2^+\hat{\psi}_3\hat{\psi}_4^+|\varphi_0\rangle = \frac{1}{V^2}\sum_{\underline{p}_1}\langle\varphi_0|\hat{c}_{\underline{p}_1}\hat{c}_{\underline{p}_1}^+\hat{c}_{\underline{p}_1}\hat{c}_{\underline{p}_1}^+|\varphi_0\rangle\exp(\cdots) \tag{2.5.16}$$

当 $V \to \infty$ 时, $\dfrac{1}{V^2}\sum\limits_{\underline{p}_1} \to \dfrac{1}{V}\displaystyle\int\frac{\mathrm{d}^3p_1}{(2\pi)^3}$, 从而 $\dfrac{1}{V}$ 的存在使得上述表达式为零. 显然若在式 (2.5.14) 中考虑编时算符, 结论也是一样的.

第六节　零温图形微扰论

格林函数是提取物理信息的一种基本理论工具, 发展各种计算相互作用体系格林函数的方法是极其重要的.

当相互作用是微扰时, 利用格林函数的 Gell–Mann Low 公式 (2.4.2) 可发展出一套行之有效的图形微扰技术. 这种图形叫费曼图. 这套技术给出了建立费曼图以及图形对格林函数 (或对散射振幅) 的贡献的费曼规则. 下面我们仍以有两两相互作用的零温费米子体系为例.

一、真空图和连通图定理

首先看格林函数的 Gell–Mann Low 公式的分母：

$$S \equiv \langle\varphi_0|S(\infty,-\infty)|\varphi_0\rangle \tag{2.6.1}$$

它是从**基态到基态** (物理真空到物理真空) **的散射振幅** (跃迁概率幅). 后面还可看到它也与真空 (基态) 能量密度移动相联系. 为方便起见, 将相互作用哈密顿写成时空坐标对称的形式. 因

$$\begin{aligned}\int \mathrm{d}t\hat{H}_{\mathrm{int}}(t) &= \frac{1}{2}\int \mathrm{d}t\mathrm{d}^3x\mathrm{d}^3x'\hat{\psi}^+_\alpha(t,\underline{x})\hat{\psi}^+_\beta(t,\underline{x}')V_{\alpha\beta,\alpha'\beta'}(\underline{x},\underline{x}')\hat{\psi}_{\beta'}(t,\underline{x}')\hat{\psi}_{\alpha'}(t,\underline{x})\\ &= \frac{1}{2}\int \mathrm{d}^4x\mathrm{d}^4x'\hat{\psi}^+_\alpha(t,\underline{x})\hat{\psi}^+_\beta(t',\underline{x}')V_{\alpha\beta,\alpha'\beta'}(\underline{x},\underline{x}')\hat{\psi}_{\beta'}(t',\underline{x}')\hat{\psi}_{\alpha'}(t,\underline{x})\delta(t-t')\\ &= \frac{1}{2}\int \mathrm{d}^4x\mathrm{d}^4x'\hat{\psi}^+_\alpha(x)\hat{\psi}^+_\beta(x')U_{\alpha\beta,\alpha'\beta'}(x,x')\hat{\psi}_{\beta'}(x')\hat{\psi}_{\alpha'}(x)\end{aligned} \tag{2.6.2}$$

其中

$$U_{\alpha\beta,\alpha'\beta'}(x,x') \equiv V_{\alpha\beta,\alpha'\beta'}(\underline{x},\underline{x}')\delta(t-t') \tag{2.6.3}$$

$\delta(t-t')$ 的出现源于非相对论性的两两相互作用是瞬时作用. S 的微扰展开可写为

$$S \equiv \langle\varphi_0|T\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int \mathrm{d}t\hat{H}_{\mathrm{int}}(t)}|\varphi_0\rangle = 1+\sum_{n=1}^{\infty}S^{(n)} \tag{2.6.4}$$

其中, 第 n 阶展开式为

$$\begin{aligned}S^{(n)} &= \frac{(-\mathrm{i})^n}{n!}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t_1\mathrm{d}t_2\cdots\mathrm{d}t_n\langle\varphi_0|T\hat{H}_{\mathrm{int}}(t_1)\hat{H}_{\mathrm{int}}(t_2)\cdots\hat{H}_{\mathrm{int}}(t_n)|\varphi_0\rangle\\ &= \frac{(-\mathrm{i})^n}{n!2^n}\int \mathrm{d}^41\mathrm{d}^41'\cdots\mathrm{d}^4n\mathrm{d}^4n'U_{\alpha_1\beta_1,\alpha_1'\beta_1'}(1,1')\cdots U_{\alpha_n\beta_n,\alpha_n'\beta_n'}(n,n')\\ &\quad\cdot\langle\varphi_0|T\hat{\psi}^+_{\alpha_1}(1)\hat{\psi}^+_{\beta_1}(1')\hat{\psi}_{\beta_1'}(1')\hat{\psi}_{\alpha_1'}(1)\cdots\hat{\psi}^+_{\alpha_n}(n)\hat{\psi}^+_{\beta_n}(n')\hat{\psi}_{\beta_n'}(n')\hat{\psi}_{\alpha_n'}(n)|\varphi_0\rangle\end{aligned} \tag{2.6.5}$$

式中, $1\equiv x_1=(t_1,\underline{x}_1)$; $1'\equiv x_1'=(t_1',\underline{x}_1')$ 等. 按广义 Wick 定理, 它可以写成若干有成对收缩 (传播子) 的项的和, 并且可以用图形来指示各种可能的收缩方式. 现在先计算一阶展开式 $S^{(1)}$：

$$\begin{aligned}S^{(1)} &= (-\mathrm{i})\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t_1\langle\varphi_0|T\hat{H}_{\mathrm{int}}(t_1)|\varphi_0\rangle\\ &= (-\mathrm{i})\frac{1}{2}\int \mathrm{d}^4x\mathrm{d}^4x'U_{\alpha\beta,\alpha'\beta'}(x,x')\langle\varphi_0|T\hat{\psi}^+_\alpha(x)\hat{\psi}^+_\beta(x')\hat{\psi}_{\beta'}(x')\hat{\psi}_{\alpha'}(x)|\varphi_0\rangle\end{aligned}$$

$$= (-\mathrm{i})\frac{1}{2}\int \mathrm{d}^4x\mathrm{d}^4x' U_{\alpha\beta,\alpha'\beta'}(\underline{x},\underline{x}')$$
$$\cdot \left[(-1)\mathrm{i}G^0_{\beta'\alpha}(x',x)\mathrm{i}G^0_{\alpha'\beta}(x,x') + \mathrm{i}G^0_{\alpha'\alpha}(x,x)\mathrm{i}G^0_{\beta'\beta}(x',x')\right] \tag{2.6.6}$$

为了能用图形和规则来得到式 (2.6.6) 的结果, 我们制定如下的**计算S(真空图贡献)的费曼图规则**.

规则 S1　(1) **自由传播子**的费曼图如图 2.6.1 所示.



图 2.6.1　自由传播子的费曼图

它代表了一个自旋为 β 的粒子从 x' 传播到 x 成为自旋为 α 的粒子.

但要注意当 $\mathrm{i}G^0_{\alpha\beta}(x,x')$ 的定义式 (2.5.8) 可知, 只有当 β 等于 α 时才不为零.

规则 S2　用虚线表示相互作用顶角 (简称**顶角**或**顶点**), 如图 2.6.2 所示.

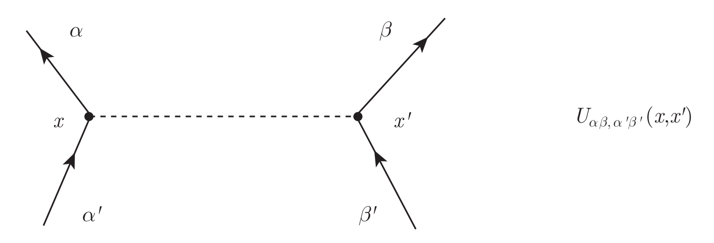


图 2.6.2　相互作用顶角

虽然顶角只用一根虚线 (U 线) 表示, 但是一个完整图形中, 每个顶角的两个端点 x,x' 必须各自要与一根入射传播子和一根出射传播子相连. 每个相互作用顶角提供一个 $U_{\alpha\beta,\alpha'\beta'}(x,x')$ 的贡献.

这里我们没有计及两两相互作用势中的因子 1/2, 这是因为在下面要讨论的所谓的图形对称因子中再去处理它.

式 (2.6.6) 可用如下两个拓扑不等价图形 (图 2.6.3) 表示.

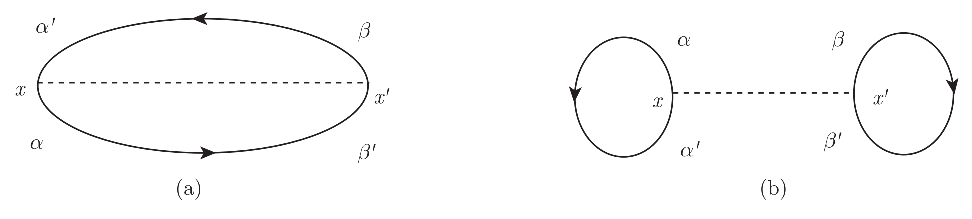


图 2.6.3　$S^{(1)}$ 的费曼图

$S^{(1)}$ 的两个图 (图 2.6.3(a) 和 (b)) 均有如下特点, 它们没有任何入射和出射的传播子. 这样的图形叫**真空图**. 由于每个图形的所有图形元件是连通的, 这两个图

是所谓的**连通图**. **注意 S 的所有阶的图形都是真空图**. 只要我们补充如下规则即可从图 2.6.3(a) 和 (b) 得出式 (2.6.6).

规则 S3 画出所有拓扑不等价 (真空) 图, 逆着箭头方向写出各个自由传播子的贡献, 顶角的贡献的写出次序无关紧要. n 阶图形中有 n 条虚线和 $2n$ 条带箭头的实线.

规则 S4 每个费米子圈贡献一个因子 (-1).

规则 S5 对于 n 阶图, 有一因子 $\dfrac{(-\mathrm{i})^n}{Q}$, 其中, $(-\mathrm{i})^n$ 来自 n 阶展开式, Q 是 (下面即将讨论的) 所谓的图形的对称因子.

规则 S6 写出所有图的贡献, 对所有内部时空坐标积分, 并对所有内部自旋指标求和.

对于一个 n 阶图 ($S^{(n)}$ 中), 除了作各个顶角两端的指标代换 (即同一顶角内的置换: $x \leftrightarrow x', \alpha \leftrightarrow \beta, \alpha' \leftrightarrow \beta'$) 之外, 还要作所有 n 个不同顶角的置换. 如果这样能导致 n 阶图共有 $\dfrac{2^n n!}{Q}$ 个不相同的图形, 那么由于这些图有相同贡献 (因为这只是相当于在 $S^{(n)}$ 积分中进行积分变量的互换), 我们就可以只画出其中任一个图, 并认为该图将提供一个因子为 $\dfrac{1}{Q}$ 的贡献, 这个因子就叫**对称因子**. 这个贡献已经包含了每个 n 阶拓扑不等价图应有的贡献 $\dfrac{1}{n!}$ 以及每个顶角中应有的贡献 $\dfrac{1}{2}$. **参量 Q 是置换群的使图形不变的对称子群的阶数**. 对于一阶展开式 $S^{(1)}$ 的两个图 (图 2.6.3(a) 和 (b)) 的对称因子均是 $\dfrac{1}{2}$.

这样, 对于一阶展开式 $S^{(1)}$ 应该有一条虚线, 有一个因子 $(-\mathrm{i})$. 式 (2.6.6) 右边积分中的第一项有一个因子 (-1), 这是由于它相对应的图 2.6.3(a) 中有一个费米圈.

显然利用这两个费曼图和以上规则就能得到式 (2.6.6).

但是在二阶展开式 $S^{(2)}$ 情形, 要用 Wick 定理来处理的式子是

$$\langle\varphi_0|T\hat{\psi}^+_{\alpha_1}(1)\hat{\psi}^+_{\beta_1}(1')\hat{\psi}_{\beta'_1}(1')\hat{\psi}_{\alpha'_1}(1)\hat{\psi}^+_{\alpha_2}(2)\hat{\psi}^+_{\beta_2}(2')\hat{\psi}_{\beta'_2}(2')\hat{\psi}_{\alpha'_2}(2)|\varphi_0\rangle$$

这将给出 24 个收缩项, 从而一共有 24 个有标记的真空图. 但是其中一些图可由另外某些图通过不同 U 线的置换或同一个 U 线内部的置换来得到, 由规则 S5 可知, 由同一个图形经过置换而得到的所有不同图形只需要画一个, 这样所需要画的图形就少得多. 在 $S^{(2)}$ 情形仅需要画 8 个图, 如图 2.6.4 所示. 因此我们可如下方便地进行.

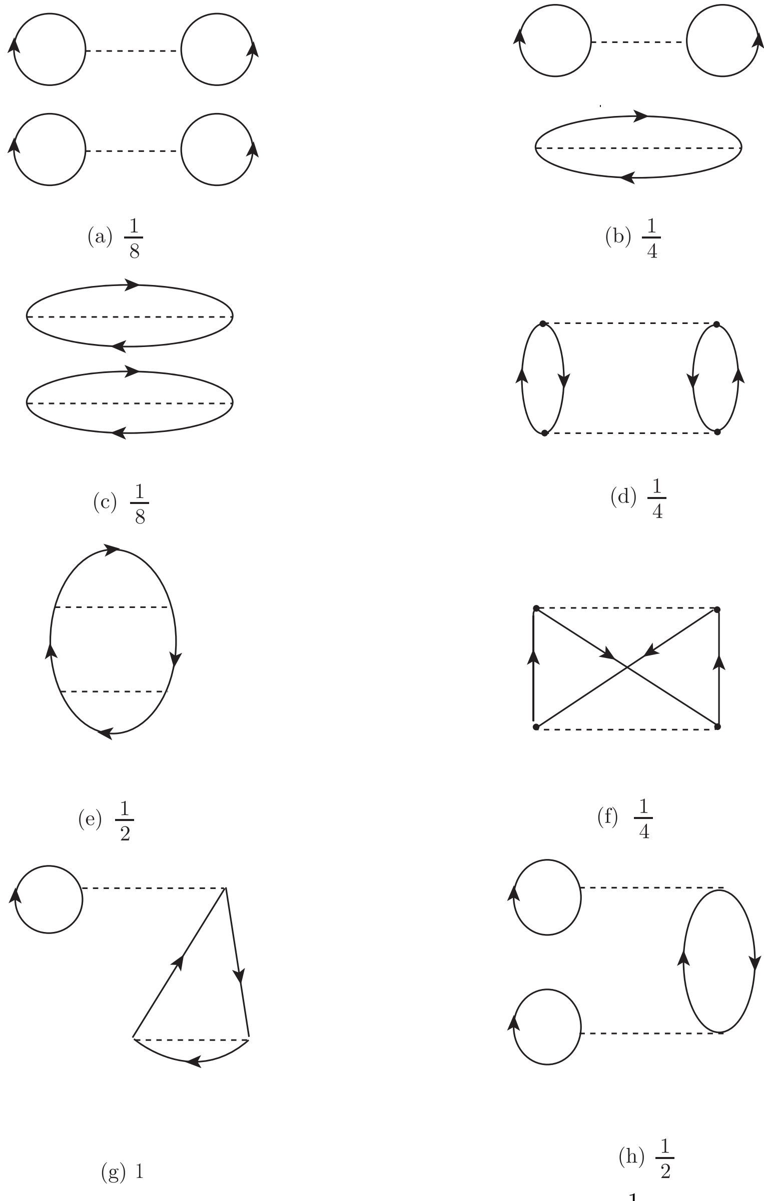
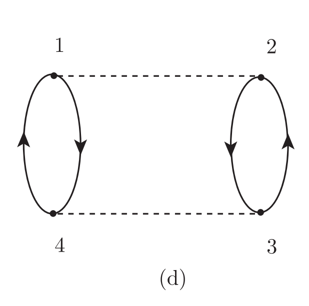


图 2.6.4　$S^{(2)}$ 的未标记图以及它们的对称因子 $(\sum \dfrac{1}{Q} = 3)$

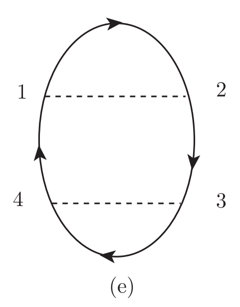
画出所有拓扑不等价的未作任何标记的真空图, 然后去计算每个图的对称因子. 计算对称因子的一个较简便办法是给每个未标记图重新加上简单标记, 然后寻求这些标记的置换群的对称子群的阶数. 这个阶数就是对称因子. 一旦求出了对称因子就可用前面的规则写出这些数目少得多的图形的总贡献了.

注意：图 2.6.4 中所有图的对称因子满足 $\sum \frac{1}{Q} = 3$. 事实上, 可以证明对于所有 n 阶图, 其对称因子满足 $\sum_{Q} \frac{1}{Q} = (2n-1)!!$.

作为计算对称因子方法的例子, 我们以图 2.6.4(d) 和 (e) 为例.



(d)



(e)

图 2.6.4

很易判断图 2.6.4(d) 的对称子群是

$$\left\{\text{恒同置换}I, \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 4 & 3 & 2 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 1 & 4 & 3 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 3 & 4 & 1 & 2 \end{pmatrix}\right\}$$

其中, 第二个群元代表两个顶角的置换; 第三个群元代表两个顶角同时进行内部端点互换; 第四个群元代表上述置换的组合. 故 $Q = 4$.

图 2.6.4(e) 的对称子群是

$$\left\{\text{单位置换}, \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 3 & 4 & 1 & 2 \end{pmatrix}\right\}$$

故 $Q = 2$.

从图 2.6.4 还可看出, 高阶真空图中出现不连通图. 尽管 S 的微扰展开中既有连通图也有不连通图, 但可以证明 S 的对数却是连通图的和. 这就是所谓的**连通图展开定理 (linked cluster theorem)**:

$$S = \exp\left\{\sum(\text{所有连通真空图})\right\} \tag{2.6.7}$$

我们可以用所谓的**复制技术 (replica technique)**来证明这个定理.

证明　因 $S^N = \mathrm{e}^{N \ln S}$, 故

$$\ln S = \lim_{N\to 0} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}N}(\mathrm{e}^{N \ln S}) = \lim_{N\to 0} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}N} S^N \tag{2.6.8}$$

这意味着, 将 S^N 按 N 的幂次展开后, N 的线性项的系数将给出 S 的对数. 注意到复制的每个 S 都是独立的, 我们用指标 $\lambda(\lambda = 1, 2, \cdots, N)$ 加以区别. 它们中的场

量也用 λ 标记. 这样 S^N 可以表达成 $S^N = \langle\varphi_0|T\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int \mathrm{d}t\sum\limits_{\lambda}\hat{H}_{\mathrm{int}}(t,\hat{\psi}_\lambda^+,\hat{\psi}_\lambda)}|\varphi_0\rangle$, 其中我们把与讨论无关的时空及自旋指标忽略掉. S^N 与 S 有同样的费曼图并且 S^N 的费曼规则与 S 的费曼规则是相同的, 唯一的区别是每个传播子都带有标记 λ. 所有进入或离开一个给定顶角的传播子都有相同的标记 λ, 所有 λ 都是从 1 到 N 进行求和. 所以图形的每一个连通部分必定携带一个单一的标记 λ, 当从 1 到 N 求和时, 就要产生一个因子 N. 而有 m 个连通部分的图将正比于 N^m, 只有正比于 N(N 的线性项) 的图才只有一个连通部分, 这就是连通图.

连通图定理可使我们方便地用图形微扰论方法计算相互作用体系的基态能量 (参见本节第四小节).

二、等时自由传播子

在上一小节中我们已经看到了形成一个闭合环的传播子以及两个端点与同一相互作用 U 线连接的传播子, 这种传播子满足 $t=t'$ 的等时关系. 但前面给出的传播子式 (2.5.7)∼ 式 (2.5.10) 仅适用于 $t\neq t'$ 情形. 事实上当 $t=t'$ 时, 式 (2.5.7) 中 $\theta(t-t')$ 无定义, 而一旦定义 $\theta(0)$ 等于任何非零常数后, 则易验证式 (2.5.7) 发散, 由此导出的式 (2.5.8)∼ 式 (2.5.10) 也无意义.

这种困难的本质可以在相对论性量子场论的框架中加以解释: 原来在式 (2.5.7) 中包含了能量大于费米能级的粒子的贡献, 但可以证明在 $t=t'$ 时只有费米海中的粒子 (空穴) 才对传播子做贡献.

目前在非相对论框架内只能进行如下的形式规定来保证只有费米海中的粒子才做贡献, 即对规则 S1 进行如下补充规定:

规则 S1　(2) 对于两个时间变量相等的传播子应解释成

$$G^0_{\alpha\beta}(\underline{x}t;\underline{x}'t^+) = \lim_{t'\to t^+} G^0_{\alpha\beta}(\underline{x}t;\underline{x}'t')$$

其中, $t^+ = t+0^+$.

有两种时间变量相等情形, 一种是形成一个闭合圈的传播子 (下面的蝌蚪图):

α, β, x　　$\mathrm{i}G^0_{\alpha\beta}(\underline{x}t;\underline{x}t^+)$

$$\mathrm{i}G^0_{\alpha\beta}(x,x) \equiv \mathrm{i}G^0_{\alpha\beta}(x,x')|_{\underline{x}'=\underline{x},t'=t+0^+} = -n\delta_{\alpha\beta}/(2s+1) \tag{2.6.9}$$

注: 式 (2.6.9) 最后一个等式可利用式 (2.5.7) 来推导出, 其中, n 代表粒子数密度, $2s+1$ 是自旋简并度.

另一种是两个端点与同一相互作用 U 线连接的传播子:

x', β　　x, α　　$\mathrm{i}G^0_{\alpha\beta}(\underline{x}t;\underline{x}'t^+)$

$$\mathrm{i}G^0_{\alpha\beta}(\underline{x}t;\underline{x}'t^+)\equiv \mathrm{i}G^0_{\alpha\beta}(x,x')|_{t'=t^+}=-\delta_{\alpha\beta}\frac{1}{V}\sum_{\underline{p}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\eta+\mathrm{i}\underline{p}\cdot(\underline{x}-\underline{x}')}\theta(\underline{p}_\mathrm{F}-|\underline{p}|)$$

$$\underline{\underline{V\to\infty}}-\int_{|\underline{p}|<p_\mathrm{F}}\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}\delta_{\alpha\beta}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\eta+\mathrm{i}\underline{p}\cdot(\underline{x}-\underline{x}')} \tag{2.6.10}$$

其中, $\eta\to 0^+$.

以上规则可以形式地认为等时传播子也是由同一个 $\hat{H}_\mathrm{int}$ 中两个算符的收缩得到的, 而它们在 $\hat{H}_\mathrm{int}$ 中出现的次序为 $\hat{\psi}^+(x')\hat{\psi}(x)$, 所以将 t' 视为 $t+0^+$. 这也是式 (2.4.7) 中所采用的方法.

三、格林函数的费曼规则

前面考虑了格林函数的 Gell-Mann Low 公式 (2.4.2) 中的分母 S, 现在再来看该式中的分子：$\langle\varphi_0|T[\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}^+_\beta(x')S(\infty,-\infty)]|\varphi_0\rangle$. 按 Wick 定理进行所有可能的成对收缩, 不同的收缩方式给出不同的费曼图. 与真空图不同的是, 真空图没有外端点, 而格林函数的图有两个外端点 x,x'. 分子给出的图形与真空图一样也有连通图和不连通图, 但格林函数的任何图形是这样的图形: 其中所有的图形元件都要以某种方式与两个外端点相连通. 可以证明 (参见附录 2C) 有

$$\begin{aligned}&\langle\varphi_0|T[\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}^+_\beta(x')S(\infty,-\infty)]|\varphi_0\rangle\\ =&\langle\varphi_0|T[\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}^+_\beta(x')S(\infty,-\infty)]|\varphi_0\rangle_\mathrm{C}\times\langle\varphi_0|S(\infty,-\infty)]|\varphi_0\rangle\end{aligned} \tag{2.6.11}$$

其中, $\langle\cdots\rangle_\mathrm{C}$ 表示该式中的收缩给出连通图. 将式 (2.6.11) 代入式 (2.4.2), 得到**基本公式:**

$$\mathrm{i}G_{\alpha\beta}(x,x')=\langle\varphi_0|T[\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}^+_\beta(x')S(\infty,-\infty)]|\varphi_0\rangle_\mathrm{C} \tag{2.6.12}$$

显然格林函数的费曼图不同于前面真空图在于它不仅是由连通图构成的, 而且有两个外端点和与之相连的两根外自由传播子. 我们在真空图中所建立的规则基本上仍然适用于格林函数的费曼图, 只需将其中的规则 S3 进行简单的修改.

规则 G1 ~ 规则 G6 分别与规则 S1 ~ 规则 S6 相同.

规则 G3 画出所有拓扑不等价连通图, 其中除零阶图 (自由传播子) 外, 都要有两根外自由传播子. 逆着箭头方向写出各个自由传播子的贡献, 顶角的贡献的写出次序无关紧要. n 阶图形中有 n 条相互作用 U 线 (虚线)(图 2.6.2) 和 $2n+1$ 条自由传播子线 (带箭头的实线).

与真空图不同, 由于外传播子的存在, 格林函数的图形的对称因子为 1.

注意: 不同的相互作用体系有不同的费曼规则, 它依赖于相互作用哈密顿的具体形式, 上述 6 条具体规则仅适用于有两两相互作用的零温全同费米子体系. 作为

一个例子, 下面利用上述规则给出一阶近似 (**Hartree-Fock(H-F) 近似**) 下的零温费米体系的格林函数. 其费曼图如图 2.6.5 所示.

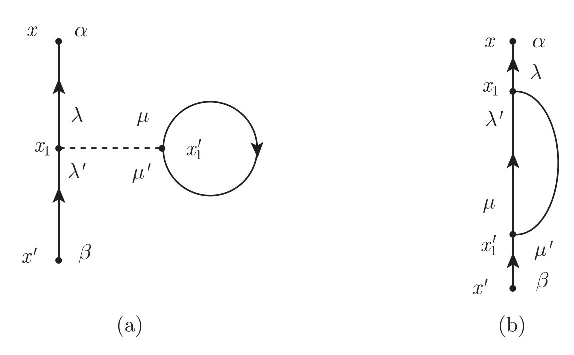


图 2.6.5　格林函数的一阶费曼图

由此可得

$$
\begin{aligned}
\mathrm{i}G_{\alpha\beta}(x,x')=&(-\mathrm{i})\int \mathrm{d}^4x_1\mathrm{d}^4x_1'\{(-1)\mathrm{i}G^0_{\alpha\lambda}(x,x_1)\mathrm{i}G^0_{\lambda'\beta}(x_1,x')U_{\lambda\mu,\lambda'\mu'}(x_1,x_1')\mathrm{i}G^0_{\mu'\mu}(x_1',x_1')\\
&+\mathrm{i}G^0_{\alpha\lambda}(x,x_1)\mathrm{i}G^0_{\lambda'\mu}(x_1,x_1')\mathrm{i}G^0_{\mu'\beta}(x_1',x')U_{\lambda\mu,\lambda'\mu'}(x_1,x_1')\}
\end{aligned}
\tag{2.6.13}
$$

上述费曼规则是坐标空间中的费曼规则.

对于具有平移不变性的体系, 将有关的量变换到动量空间将使图形的计算大为简化. 我们来建立关于真空图 (S) 以及格林函数 (G) 的**动量空间中的费曼规则**(用角标 P 表示). 由式 (2.5.10) 可知如下规则.

规则 (S、G) 1_{P}　(1°) 动量空间中的传播子为

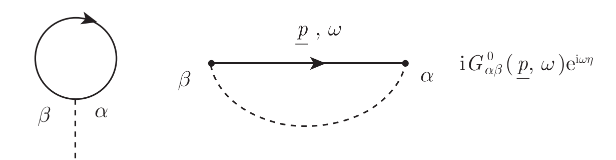
$\underline{p},\ \omega$

β ——→—— α　　$\mathrm{i}G^0_{\alpha\beta}(\underline{p},\omega)$

其中

$$
\mathrm{i}G^0_{\alpha\beta}(\underline{p},\omega)=\frac{\mathrm{i}\delta_{\alpha\beta}}{\omega-\varepsilon^0_p+\mathrm{i}0^+\mathrm{sgn}(|\underline{p}|-\underline{p}_{\mathrm{F}})}
\tag{2.6.14}
$$

(2°) 形成闭合环或两端与同一作用线连接的**等时自由传播子**应该理解成



其中, 指数 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\eta}(\eta\to 0^+)$ 是保证只有费米海中的粒子做贡献的一种技巧, 可证明如下.

证明 因

$$
\begin{aligned}
\mathrm{i}G^0_{\alpha\beta}(x-x') &= \int \frac{\mathrm{d}^4p}{(2\pi)^4}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p\cdot(x-x')}\mathrm{i}G^0_{\alpha\beta}(p)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\eta} \\
&= \int \frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^4}\int \mathrm{d}\omega \frac{\mathrm{i}\delta_{\alpha\beta}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\eta}}{\omega-\varepsilon^0_p+\mathrm{i}0^+\mathrm{sgn}(|\underline{p}|-p_\mathrm{F})}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p\cdot(x-x')}
\end{aligned}
$$

正是 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\eta}(\eta\to 0^+)$ 使得我们可以选择无穷大上半圆周作为积分回路, 而在这个上半圆周回路中只有一个单极点, 即 $\mathrm{sgn}(|\underline{p}|-p_\mathrm{F})$ 为负时的极点, 这意味着只有费米海中的粒子才做贡献. 由残数定理不难验证上述积分能给出式 (2.6.10) 或式 (2.6.9).

下面再来导出相互作用顶角 $U(x,x')=U(x-x')=V(\underline{x},\underline{x}')\delta(t-t')$ 的傅里叶变换. 因

$$
U(x-x') \equiv \int \frac{\mathrm{d}^4p}{(2\pi)^4}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p\cdot(x-x')}U(p) \tag{2.6.15}
$$

所以有

$$
\begin{aligned}
U_{\alpha\beta,\alpha'\beta'}(p) &= \int \mathrm{d}^4x\mathrm{e}^{\mathrm{i}p\cdot x}U_{\alpha\beta,\alpha'\beta'}(x) = \int \mathrm{d}^4x\mathrm{e}^{\mathrm{i}p\cdot x}V_{\alpha\beta,\alpha'\beta'}(\underline{x})\delta(t) \\
&= \int \mathrm{d}^3x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\underline{p}\cdot\underline{x}}V_{\alpha\beta,\alpha'\beta'}(\underline{x}) \equiv V_{\alpha\beta,\alpha'\beta'}(\underline{p})
\end{aligned} \tag{2.6.16}
$$

现在用图 2.6.5(b) 为例来导出顶角的费曼规则. 因为图 2.6.5(b) 的格林函数为

$$
\begin{aligned}
&\mathrm{i}G^{(\mathrm{b})}_{\alpha\beta}(x,x') \\
&= (-\mathrm{i})\int \mathrm{d}^4x_1\mathrm{d}^4x_1'\mathrm{i}G^0_{\alpha\lambda}(x,x_1)\mathrm{i}G^0_{\lambda'\mu}(x_1,x_1')\mathrm{i}G^0_{\mu'\beta}(x_1',x')U_{\lambda\mu,\lambda'\mu'}(x_1,x_1') \\
&= -\mathrm{i}\int \mathrm{d}^4x_1\mathrm{d}^4x_1'\int\frac{\mathrm{d}^4p\mathrm{d}^4p_1\mathrm{d}^4p_2\mathrm{d}^4q}{(2\pi)^{16}}\mathrm{i}G^0_{\alpha\lambda}(p)\mathrm{i}G^0_{\lambda'\mu}(p_1)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_1\eta}\mathrm{i}G^0_{\mu'\beta}(p_2)U_{\lambda\mu,\lambda'\mu'}(q) \\
&\quad\cdot\exp\{-\mathrm{i}[p\cdot(x-x_1)+p_1\cdot(x_1-x_1')+p_2\cdot(x_1'-x')+q\cdot(x_1-x_1')]\} \\
&= -\mathrm{i}\int\frac{\mathrm{d}^4p\mathrm{d}^4p_1\mathrm{d}^4p_2\mathrm{d}^4q}{(2\pi)^{16}}\mathrm{i}G^0_{\alpha\lambda}(p)\mathrm{i}G^0_{\lambda'\mu}(p_1)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_1\eta}\mathrm{i}G^0_{\mu'\beta}(p_2)U_{\lambda\mu,\lambda'\mu'}(q) \\
&\quad\cdot(2\pi)^4\delta^4(-p+q+p_1)(2\pi)^4\delta^4(-p_1-q+p_2)\exp\{-\mathrm{i}[p\cdot x-p_2\cdot x']\} \\
&= -\mathrm{i}\int\frac{\mathrm{d}^4p\mathrm{d}^4p_1}{(2\pi)^8}\mathrm{i}G^0_{\alpha\lambda}(p)\mathrm{i}G^0_{\lambda'\mu}(p_1)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_1\eta}\mathrm{i}G^0_{\mu'\beta}(p)U_{\lambda\mu,\lambda'\mu'}(p-p_1)\exp[-\mathrm{i}p\cdot(x-x')]
\end{aligned} \tag{2.6.17}
$$

这意味着 $\mathrm{i}G^{(\mathrm{b})}_{\alpha\beta}(x,x')$ 的傅里叶变换为

$$
\mathrm{i}G^{(\mathrm{b})}_{\alpha\beta}(p) = -\mathrm{i}\int\frac{\mathrm{d}^4p_1}{(2\pi)^4}\mathrm{i}G^0_{\alpha\lambda}(p)\mathrm{i}G^0_{\lambda'\mu}(p_1)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_1\eta}\mathrm{i}G^0_{\mu'\beta}(p)U_{\lambda\mu,\lambda'\mu'}(p-p_1) \tag{2.6.18}
$$

因而图 2.6.5 可改用图 2.6.6 来表示, 其中标注了对称因子 1. 我们可总结出顶角的规则如下.

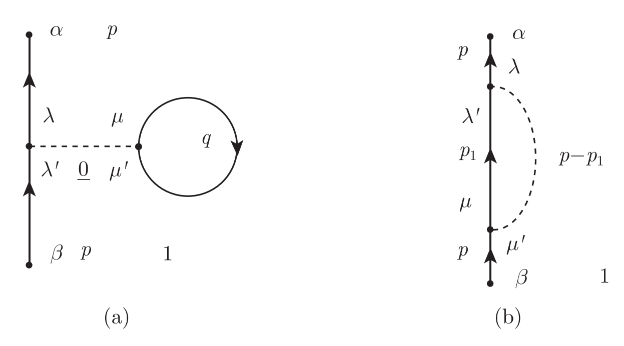
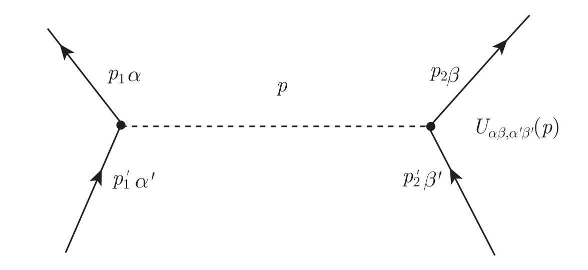


图 2.6.6　动量空间中格林函数的一阶费曼图

规则 (S、G) 2_{P}　相互作用顶角为



并且在顶角的两个端点, 必须都要满足**能量–动量守恒定律**.

注：端点处的能量–动量守恒也可以从式 (2.6.17) 的推导过程中出现的函数 $(2\pi)^4\delta^4(\cdots)$ 类型而看出.

原来的规则 $S5$ 应该改为

规则 (S、G) 5_{P}　写出所有图的贡献, 对所有内部 4 动量积分 (带有权重因子 $\dfrac{1}{(2\pi)^4}$), 并对所有内部自旋指标求和.

所有其他的规则仍然与坐标空间中的相应规则一样.

根据所建立的规则, 我们可以写出图 2.6.6(a) 的贡献为

$$\mathrm{i}G^{(\mathrm{a})}_{\alpha\beta}(p)=(-\mathrm{i})\int\frac{\mathrm{d}^4q}{(2\pi)^4}(-1)\mathrm{i}G^0_{\alpha\lambda}(p)\mathrm{i}G^0_{\lambda'\beta}(p)V_{\lambda\mu,\lambda'\mu'}(\underline{0})\mathrm{i}G^0_{\mu'\mu}(q)\mathrm{e}^{\mathrm{i}q^0\eta}\tag{2.6.19}$$

式 (2.6.18) 和式 (2.6.19) 的和给出了 H-F 近似下有两两相互作用的零温费米子体系的动量空间格林函数.

$$\mathrm{i}G_{\alpha\beta}(p)=\mathrm{i}G^{(\mathrm{a})}_{\alpha\beta}(p)+\mathrm{i}G^{(\mathrm{b})}_{\alpha\beta}(p)\tag{2.6.20}$$

四、应用: 零温费米体系的基态能量

现在我们利用前面建立起的费曼规则来研究零温费米体系的基态能量.

(一) 无相互作用体系的基态能量密度移动

即使不考虑相互作用, 而仅考虑粒子的动能, 费米能级的存在也会引起基态能量发生改变 (移动). 移动的大小为

$$\Delta E^0 = \tilde{s}\sum_{\underline{p}=0}^{p_{\rm F}}\frac{\underline{p}^2}{2m} = \tilde{s}\int\frac{V{\rm d}^3p}{(2\pi)^3}\frac{\underline{p}^2}{2m}\theta(p_{\rm F}-|\underline{p}|) \tag{2.6.21}$$

其中, $\tilde{s}=2s+1$ 代表**自旋简并度**. 由此得无相互作用体系的**基态能量密度移动**

$$\frac{\Delta E^0}{V} = \tilde{s}\int_0^{p_{\rm F}}\frac{\underline{p}^2{\rm d}|\underline{p}|{\rm d}\Omega}{(2\pi)^3}\frac{\underline{p}^2}{2m} = \tilde{s}(p_{\rm F})^5\frac{1}{20\pi^2 m} \tag{2.6.22}$$

而费米子数为

$$N = \tilde{s}\sum_{\underline{p}=0}^{p_{\rm F}}1 = \tilde{s}\int\frac{V{\rm d}^3p}{(2\pi)^3}\theta(p_{\rm F}-|\underline{p}|)$$

所以费米海中费米子数密度为

$$n = \frac{N}{V} = \tilde{s}\int_{|\underline{p}|<p_{\rm F}}\frac{{\rm d}^3p}{(2\pi)^3} = \tilde{s}\frac{p_{\rm F}^3}{6\pi^2} \tag{2.6.23}$$

所以费米海 (新基态) 中每个粒子的平均费米能量为

$$\frac{\Delta E^0}{N} = \frac{3}{5}\frac{p_{\rm F}^2}{2m} = \frac{3}{5}\varepsilon_{\rm F}$$

(二) 相互作用体系的基态能量移动

我们先来寻找基态能量移动与 S 矩阵的基态平均的联系. 当给无相互作用体系加上相互作用, 体系的基态能量也会发生改变并使得 S 矩阵的基态平均值的相位发生变化. 设加上相互作用的时间 T 充分长, 则

$$S[T] \equiv \langle\varphi_0|S\left(\frac{T}{2},-\frac{T}{2}\right)|\varphi_0\rangle = \langle\varphi_0|S\left(\frac{T}{2},0\right)S\left(0,-\frac{T}{2}\right)|\varphi_0\rangle$$

再插入一组完全的本征态集 $\{|\lambda\rangle\}$, 则

$$S[T] = \sum_{\lambda}\langle\varphi_0|S\left(\frac{T}{2},0\right)|\lambda\rangle\langle\lambda|S\left(0,-\frac{T}{2}\right)|\varphi_0\rangle$$

其中, $S\left(0,-\frac{T}{2}\right)|\varphi_0\rangle$ 在 T 趋于无穷时, 趋于相互作用体系基态 $|\psi_0^{(\rm H)}\rangle$, 因而 $\{|\lambda\rangle\}$ 中只有唯一的 $|\psi_0^{(\rm H)}\rangle$ 才与 $S\left(0,-\frac{T}{2}\right)|\varphi_0\rangle$ 有非零的交叠; 所以上式化成

$$S[T] = \langle\varphi_0|S\left(\frac{T}{2},0\right)|\psi_0^{(\rm H)}\rangle\langle\psi_0^{(\rm H)}|S^{+}\left(-\frac{T}{2},0\right)|\varphi_0\rangle$$

$$\equiv \mathfrak{A}(T)\mathfrak{A}^+(-T) \tag{2.6.24}$$

其中, $\mathfrak{A}(T) \equiv \langle\varphi_0|S\left(\frac{T}{2},0\right)|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle$. 利用式 (2.2.14) 知它对时间 T 的导数为

$$\begin{aligned}\frac{\partial\mathfrak{A}(T)}{\partial T} &= \frac{\partial}{\partial T}\langle\varphi_0|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}_0T/2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}T/2}|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle \\ &= \frac{\mathrm{i}}{2}\langle\varphi_0|\left\{\hat{H}_0S\left(\frac{T}{2},0\right)-S\left(\frac{T}{2},0\right)\hat{H}\right\}|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle = -\frac{\mathrm{i}}{2}\Delta E^0\mathfrak{A}(T)\end{aligned}$$

其中, $\Delta E^0 = E_0 - W_0$ 是相互作用体系基态能量与无相互作用体系基态能量之差, 即基态能量的移动.

同样, 有 $\dfrac{\partial\mathfrak{A}^+(-T)}{\partial T} = -\dfrac{\mathrm{i}}{2}\Delta E^0\mathfrak{A}^+(-T)$, 故

$$\frac{\partial S[T]}{\partial T} = -\mathrm{i}\Delta E^0 S[T] \tag{2.6.25}$$

由此得知, $S[T] = \mathrm{const}\cdot\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Delta E^0 T}$, 或者

$$\ln S[T] = -\mathrm{i}\Delta E^0 T + \mathrm{const} \tag{2.6.26}$$

又根据连通图定理 (2.6.7) 知

$$\ln S = \sum[\text{所有连通真空图}] \tag{2.6.27}$$

所以当 T 充分大时, 有

$$-\mathrm{i}\Delta E^0 T = \sum[\text{所有连通真空图}] \tag{2.6.28}$$

(三) H-F 近似下的基态能量密度移动

对于最低阶连通的费曼真空图, 有如图 2.6.7 所示的两个 (对称因子 $Q = 2$).

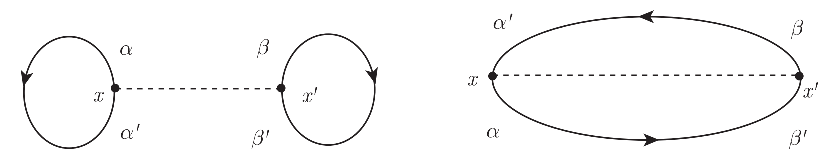


图 2.6.7　最低阶真空图

第一个图的贡献为

$$A_1 = (-\mathrm{i})\frac{1}{2}\int \mathrm{d}^4x\mathrm{d}^4x'(-1)^2\mathrm{i}G^0_{\alpha'\alpha}(x,x)U_{\alpha\beta,\alpha'\beta'}(x-x')\mathrm{i}G^0_{\beta'\beta}(x',x')$$

第二个图的贡献为

$$A_1 = (-\mathrm{i})\frac{1}{2}\int \mathrm{d}^4x\mathrm{d}^4x'(-1)\mathrm{i}G^0_{\alpha'\beta}(x-x')\mathrm{i}G^0_{\beta'\alpha}(x'-x)U_{\alpha\beta,\alpha'\beta'}(x-x')$$

所以根据式 (2.6.28) 知, 在 H-F 近似下, 有

$$\begin{aligned}-\mathrm{i}\Delta E^0 T &= A_1 + A_2\\ &= \frac{(-\mathrm{i})}{2}\int \mathrm{d}^4x\mathrm{d}^4x'\left\{(-1)\mathrm{i}G^0_{\alpha'\alpha}(x,x)U_{\alpha\beta,\alpha'\beta'}(x-x')(-1)\mathrm{i}G^0_{\beta'\beta}(x',x')\right.\\ &\quad\left.+(-1)\mathrm{i}G^0_{\alpha'\beta}(x-x')\mathrm{i}G^0_{\beta'\alpha}(x'-x)\,U_{\alpha\beta,\alpha'\beta'}(x-x')\right\}\end{aligned} \tag{2.6.29}$$

其中, $G(x,x), G(x',x')$ 为常数, 其余均为 $x-x'$ 的函数, 故式 (2.6.29) 中的被积函数仅依赖于 $x-x'$. 这样可以把式 (2.6.29) 的积分改成

$$\int \mathrm{d}^4x\mathrm{d}^4x'[\cdots] = VT\int \mathrm{d}^4(x-x')[\cdots] \tag{2.6.30}$$

由式 (2.6.29) 和式 (2.6.30) 可得真空能量密度移动

$$\begin{aligned}\Delta\varepsilon^0 \equiv& \frac{\Delta E^0}{V} = \frac{1}{2}\int \mathrm{d}^4(x-x')\left\{\mathrm{i}G^0_{\alpha'\alpha}(x,x)U_{\alpha\beta,\alpha'\beta'}(x-x')\mathrm{i}G^0_{\beta'\beta}(x',x')\right.\\ &\left.-\,\mathrm{i}G^0_{\alpha'\beta}(x-x')\mathrm{i}G^0_{\beta'\alpha}(x'-x)\,U_{\alpha\beta,\alpha'\beta'}(x-x')\right\}\\ =&\frac{1}{2}\int \mathrm{d}^4(x-x')\left\{\delta_{\alpha'\alpha}\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}(-1)\mathrm{e}^{\mathrm{i}0\cdot(x-x')}\theta(p_\mathrm{F}-|\underline{p}|)\right.\\ &\cdot\,\delta_{\beta'\beta}\int\frac{\mathrm{d}^3p'}{(2\pi)^3}(-1)\mathrm{e}^{\mathrm{i}p'\cdot(y-y)}\theta(p_\mathrm{F}-|\underline{p}'|)U_{\alpha\beta,\alpha'\beta'}(x-x')\\ &-\,\delta_{\alpha'\beta}\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}(-1)\mathrm{e}^{\mathrm{i}p\cdot(x'-x)}\theta(p_\mathrm{F}-|\underline{p}|)\\ &\left.\cdot\,\delta_{\beta'\alpha}\int\frac{\mathrm{d}^3p'}{(2\pi)^3}(-1)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p'\cdot(x-x')}\theta(p_\mathrm{F}-|\underline{p}'|)\,U_{\alpha\beta,\alpha'\beta'}(x-x')\right\}\\ =&\frac{1}{2}\int_{|\underline{p}|<p_\mathrm{F}}\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}\int_{|\underline{p}'|<p_\mathrm{F}}\frac{\mathrm{d}^3p'}{(2\pi)^3}\left[U_{\alpha\beta,\alpha\beta}(0)-U_{\alpha\beta,\beta\alpha}(p'-p)\right]\end{aligned} \tag{2.6.31}$$

其中, $U(0), U(p'-p)$ 是 $U(x-x')$ 的傅里叶变换. **式 (2.6.31) 也可以直接利用动量空间中的费曼规则来从连通真空图得出**. 这个结果不仅适用于 H-F 近似, 也适用于任意阶. 事实上, 由于所有自由传播子和相互作用仅依赖于坐标差, 所以对 n 个时空坐标的积分总可以成对地分成对质心坐标和相对坐标的积分, 而对质心坐标的积分可以单独积出得

$$\int \mathrm{d}^4x_\mathrm{cm} = VT \tag{2.6.32}$$

其中, $x_{\rm cm}$ 是质心时空坐标; V 是体系的体积; T 是相互作用的时间. 剩下的积分就是对相对坐标的积分 (它们要满足能量–动量守恒), 由此看出 (参见式 (2.6.31)), 对基态能量密度移动有

$$\Delta\varepsilon^0 = \mathrm{i}\sum[\text{动量空间中的连通真空图}] \tag{2.6.33}$$

在以上的讨论中, 我们均没有指明两体相互作用势的具体形式. 这种势可以是与自旋有关的, 例如, 有如下形式的两体势:

$$U_{\alpha\beta,\alpha'\beta'} = V_1\delta_{\alpha\alpha'}\delta_{\beta\beta'} + V_2(\sigma^i)_{\alpha\alpha'}(\sigma^i)_{\beta\beta'} \tag{2.6.34}$$

其中, V_1, V_2 是与自旋无关的函数; $\sigma^i (i = 1, 2, 3)$ 是泡利矩阵. 但是我们以后将更多地讨论与自旋无关的两体势. 例如, 在金属电子气模型中, 有

$$U_{\alpha\beta,\alpha'\beta'}(p) = U(p)\delta_{\alpha\alpha'}\delta_{\beta\beta'} \tag{2.6.35}$$

五、顶角对称化表象 (Hugenholtz 表象)

在粒子之间是两两相互作用的情形, 可使微扰论更具有对称的形式, 特别是当这种相互作用与自旋有关时, 这种更对称化的形式特别方便, 其费曼图的数目也会大大减少. 这种顶角对称化的表象有时被称为 **Hugenholtz 表象**.

首先将哈密顿对时间的积分改造成如下对各变量都是对称的形式:

$$\begin{aligned}\int \mathrm{d}t\hat{H}_{\rm int}(t) &= \frac{1}{2}\int \mathrm{d}t\mathrm{d}^3x\mathrm{d}^3x'\hat{\psi}^+_\alpha(\underline{x},t)\hat{\psi}^+_\beta(\underline{x}',t)V_{\alpha\beta,\alpha'\beta'}(\underline{x},\underline{x}')\hat{\psi}_{\beta'}(\underline{x}',t)\hat{\psi}_{\alpha'}(\underline{x},t)\\ &= \frac{1}{4}\int \mathrm{d}^4x_1\mathrm{d}^4x_2\mathrm{d}^4x_3\mathrm{d}^4x_4\hat{\psi}^+_{\gamma_1}(x_1)\hat{\psi}^+_{\gamma_2}(x_2)\\ &\quad\cdot \mathit{\Gamma}^{(0)}_{\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4}(x_1x_2,x_3x_4)\hat{\psi}_{\gamma_4}(x_4)\hat{\psi}_{\gamma_3}(x_3)\end{aligned} \tag{2.6.36}$$

考虑到场算符的对易性质, 可知对于玻色场有

$$\begin{aligned}\mathit{\Gamma}^{(0)}_{\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4}(x_1x_2,x_3x_4) &= \mathit{\Gamma}^{(0)}_{\gamma_2\gamma_1\gamma_3\gamma_4}(x_2x_1,x_3x_4) = \mathit{\Gamma}^{(0)}_{\gamma_1\gamma_2\gamma_4\gamma_3}(x_1x_2,x_4x_3)\\ &= \mathit{\Gamma}^{(0)}_{\gamma_2\gamma_1\gamma_4\gamma_3}(x_2x_1,x_4x_3)\end{aligned} \tag{2.6.37}$$

对于费米场有

$$\begin{aligned}\mathit{\Gamma}^{(0)}_{\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4}(x_1x_2,x_3x_4) &= -\mathit{\Gamma}^{(0)}_{\gamma_2\gamma_1\gamma_3\gamma_4}(x_2x_1,x_3x_4) = -\mathit{\Gamma}^{(0)}_{\gamma_1\gamma_2\gamma_4\gamma_3}(x_1x_2,x_4x_3)\\ &= \mathit{\Gamma}^{(0)}_{\gamma_2\gamma_1\gamma_4\gamma_3}(x_2x_1,x_4x_3)\end{aligned} \tag{2.6.38}$$

由式 (2.6.36) 可知

$$\mathit{\Gamma}^{(0)}_{\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4}(x_1x_2,x_3x_4) = V_{\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4}(\underline{x}_1,\underline{x}_2)\delta(t_1-t_2)\delta(x_1-x_3)\delta(x_2-x_4)$$

$$\pm V_{\gamma_1\gamma_2\gamma_4\gamma_3}(\underline{x}_1,\underline{x}_2)\delta(t_1-t_2)\delta(x_1-x_4)\delta(x_2-x_3) \quad (2.6.39)$$

以下仍只考虑费米子体系情形, 此时式 (2.6.39) 右边第二项取负号.

格林函数的一级修正为

$$\begin{aligned}\mathrm{i}G^{(1)}_{\alpha\beta}(x,x') =&(-\mathrm{i})\frac{1}{4}\int \mathrm{d}^4x_1\mathrm{d}^4x_2\mathrm{d}^4x_3\mathrm{d}^4x_4\varGamma^{(0)}_{\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4}(x_1x_2,x_3x_4)\\&\cdot\langle\varphi_0|T\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}^+_\beta(x')\hat{\psi}^+_{\gamma_1}(x_1)\hat{\psi}^+_{\gamma_2}(x_2)\hat{\psi}_{\gamma_4}(x_4)\hat{\psi}_{\gamma_3}(x_3)|\varphi_0\rangle_\mathrm{c}\end{aligned}$$

利用 $\Gamma^{(0)}$ 的对称性质, 可得

$$\begin{aligned}\mathrm{i}G^{(1)}_{\alpha\beta}(x,x') =&(-\mathrm{i})(-1)\int \mathrm{d}^4x_1\mathrm{d}^4x_2\mathrm{d}^4x_3\mathrm{d}^4x_4\varGamma^{(0)}_{\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4}(x_1x_2,x_3x_4)\\&\cdot\mathrm{i}G^{(0)}_{\alpha\gamma_1}(x-x_1)\mathrm{i}G^{(0)}_{\gamma_4\gamma_2}(x_4-x_2)\mathrm{i}G^{(0)}_{\gamma_3\beta}(x_3-x')\end{aligned} \quad (2.6.40)$$

其费曼图如图 2.6.8 所示.

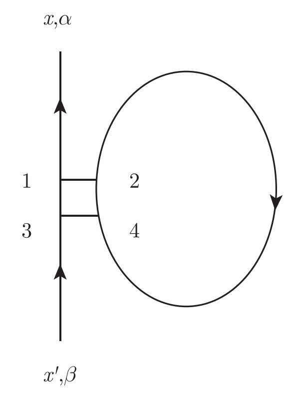


图 2.6.8 $\mathrm{i}G^{(1)}_{\alpha\beta}(x,x')$ 的图示

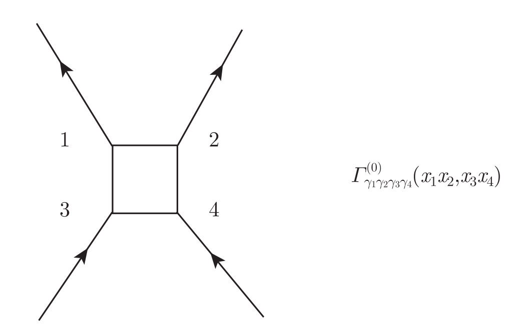
图 2.6.8 中, 空心方框代表顶角 $\Gamma^{(0)}$, 1 代表 x_1,γ_1 等. 式 (2.6.40) 积分前的系数 -1 可看成一个费米圈的效应.

利用式 (2.6.39) 不难验证式 (2.6.40) 等同于式 (2.6.13).

类似地可导出格林函数的二级修正等. 可以总结出 **Hugenholtz 表象中**两两相互作用费米子体系在**坐标空间中的格林函数的计算规则**(用角标 Hu 表示) 如下.

规则 G1$^{(\mathrm{Hu})}$ 与规则 G1 同.

规则 G2$^{(\mathrm{Hu})}$ 用空心方框代表顶角, 它提供如下一个因子:



每个顶角一定要与两根入射线和两根出射线相连.

规则 G3$^{(\mathrm{Hu})}$、**规则 G4**$^{(\mathrm{Hu})}$、**规则 G5**$^{(\mathrm{Hu})}$、**规则 G6**$^{(\mathrm{Hu})}$ 分别与规则 G3、规则 G4、规则 G5、规则 G6 相同.

规则 G7$^{(\mathrm{Hu})}$　若一对传播子从同一顶角出发, 并到达同一顶角 (该顶角可以是原顶角), 而且传播方向一致, 那么这两根线叫一**等价对**. 若一个图形中的等价对的数目为 n_{e}, 还将提供一个因子 $1/2^{n_{\mathrm{e}}}$.

例如, 图 2.6.9(a) 和 (b) 中带箭头的是等价对, 但图 2.6.9(c) 中不是等价对.

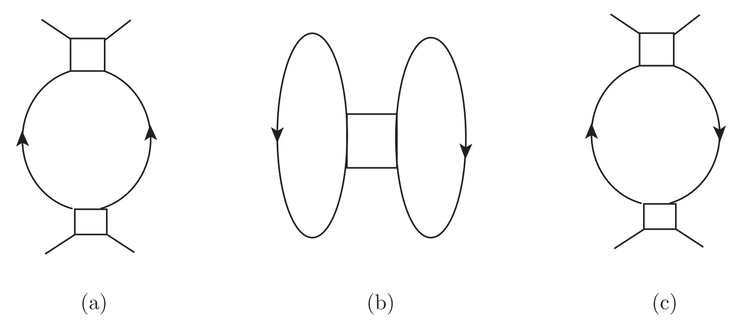


图 2.6.9　图形中的等价对

为了看出规则 **G7**$^{(\mathrm{Hu})}$ 的合理性, 我们首先考虑从一给定顶角 I 出射的两根传播子, 若它们不是等价对, 则会到达不同的顶角 (如顶角 J 和 K), 并且其他到达顶角 J 和 K 的传播子必不属于等价对. 由于在顶角 I 上的每条不等价出射线与 J 和 K 的收缩有两种选择, 我们可以赋予每条这种线的端点一个因子 $\sqrt{2}$, 则两个 $\sqrt{2}$ 的乘积正好解释了这两种选择. 从而可用出自一个顶角的不等价线对的 4 个 $\sqrt{2}$ 因子来消去式 (2.6.36) 中的系数因子 1/4. 然后考虑来自一给定顶角的两条出射传播子是一等价对的情形, 这对线必须到达相同的顶角, 因此一共只有两个相同的收缩. 而与该等价对相联系的顶角的因子是 1/4, 则相当于每个等价对将贡献一个整体因子 1/2.

现利用上述规则给出格林函数的二级修正 $\mathrm{i}G^{(2)}$, 其图形如图 2.6.10 所示.

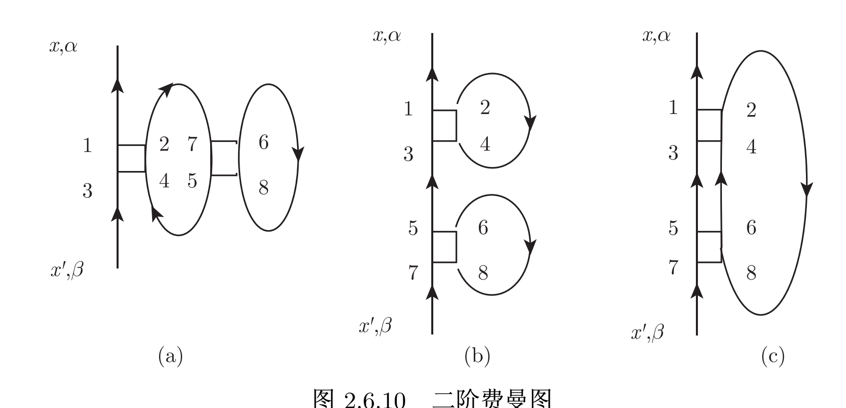


图 2.6.10　二阶费曼图

在图 2.6.10(a) 和 (b) 中无等价线对, 但有两个费米圈. 在图 2.6.10(c) 中有一个等价对和一个费米圈.

$$\begin{aligned}\mathrm{i}G^{(2)}_{(\mathrm{a})\alpha\beta}(x,x') =&(-\mathrm{i})^2(-1)^2\int \mathrm{d}^4x_1\mathrm{d}^4x_2\cdots\mathrm{d}^4x_8\\ &\cdot \mathit{\Gamma}^{(0)}_{\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4}(x_1x_2,x_3x_4)\mathit{\Gamma}^{(0)}_{\gamma_5\gamma_6\gamma_7\gamma_8}(x_5x_6,x_7x_8)\mathrm{i}G^0_{\alpha\gamma_1}(x-x_1)\\ &\cdot \mathrm{i}G^0_{\gamma_3\beta}(x_3-x')\mathrm{i}G^0_{\gamma_4\gamma_5}(x_4-x_5)\mathrm{i}G^0_{\gamma_7\gamma_2}(x_7-x_2)\mathrm{i}G^0_{\gamma_8\gamma_6}(x_8-x_6)\end{aligned} \tag{2.6.41}$$

$$\begin{aligned}\mathrm{i}G^{(2)}_{(\mathrm{b})\alpha\beta}(x,x') =&(-\mathrm{i})^2(-1)^2\int \mathrm{d}^4x_1\mathrm{d}^4x_2\cdots d^4x_8\\ &\cdot \mathit{\Gamma}^{(0)}_{\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4}(x_1x_2,x_3x_4)\mathit{\Gamma}^{(0)}_{\gamma_5\gamma_6\gamma_7\gamma_8}(x_5x_6,x_7x_8)\mathrm{i}G^0_{\alpha\gamma_1}(x-x_1)\\ &\cdot \mathrm{i}G^0_{\gamma_3\gamma_5}(x_3-x_5)\mathrm{i}G^0_{\gamma_7\beta}(x_7-x')\mathrm{i}G^0_{\gamma_4\gamma_2}(x_4-x_2)\mathrm{i}G^0_{\gamma_8\gamma_6}(x_8-x_6)\end{aligned} \tag{2.6.42}$$

$$\begin{aligned}\mathrm{i}G^{(2)}_{(\mathrm{c})\alpha\beta}(x,x') =&(-\mathrm{i})^2(-1)\frac{1}{2}\int \mathrm{d}^4x_1\mathrm{d}^4x_2\cdots\mathrm{d}^4x_8\\ &\cdot \mathit{\Gamma}^{(0)}_{\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4}(x_1x_2,x_3x_4)\mathit{\Gamma}^{(0)}_{\gamma_5\gamma_6\gamma_7\gamma_8}(x_5x_6,x_7x_8)\mathrm{i}G^0_{\alpha\gamma_1}(x-x_1)\\ &\cdot \mathrm{i}G^0_{\gamma_3\gamma_5}(x_3-x_5)\mathrm{i}G^0_{\gamma_7\beta}(x_7-x')\mathrm{i}G^0_{\gamma_4\gamma_6}(x_4-x_6)\mathrm{i}G^0_{\gamma_8\gamma_2}(x_8-x_2)\end{aligned} \tag{2.6.43}$$

同样可得**计算**S (**真空图贡献**) **的图形规则**.

规则 S1$^{(\mathrm{Hu})}$　同于规则 S1.

规则 S2$^{(\mathrm{Hu})}$　同于规则 G2$^{(\mathrm{Hu})}$.

规则 S3$^{(\mathrm{Hu})}$ ∼ 规则 S6$^{(\mathrm{Hu})}$　分别同于规则 S3∼ 规则 S6.

规则 S7$^{(\mathrm{Hu})}$　同于规则 G7$^{(\mathrm{Hu})}$.

与格林函数情形不同的是, 这里需要注意对称因子 Q (仅对不同顶角之间的置换而言) 计算. 图 2.6.11 给出了几个具体例子.

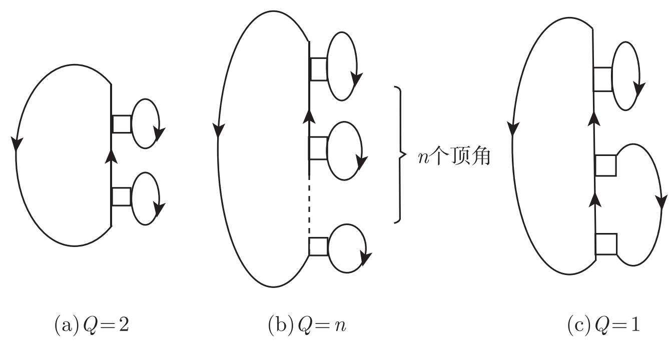


图 2.6.11　对称因子 Q

为了给出**动量表象中的图形规则**, 考虑到式 (2.6.39) 已表明 $\Gamma^{(0)}$ 只和坐标差有关, 故其傅里叶分量必含有反映能量–动量守恒的狄拉克 δ 函数, 故我们将 $\Gamma^{(0)}$ 的傅里叶分量定义为

$$\begin{aligned}&(2\pi)^4\delta^4(p_1+p_2-p_3-p_4)\Gamma^{(0)}_{\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4}(p_1,p_2;p_3,p_1+p_2-p_3)\\ \equiv&\int \mathrm{d}^4x_1\mathrm{d}^4x_2\cdots\mathrm{d}^4x_4\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p_1x_1-\mathrm{i}p_2x_2+\mathrm{i}p_3x_3+\mathrm{i}p_4x_4}\Gamma^{(0)}_{\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4}(x_1x_2,x_3x_4)\end{aligned} \tag{2.6.44}$$

事实上, 可设 $\Gamma^{(0)}$ 仅依赖于三个独立的坐标差 x_3-x_4,x_1-x_4,x_2-x_4, 由于

$$p_1x_1+p_2x_2-p_3x_3-p_4x_4=p_1(x_1-x_4)+p_2(x_2-x_4)-p_3(x_3-x_4)+(p_1+p_2-p_3-p_4)x_4$$

故将对 x_1,x_2,x_3,x_4 的积分改成对 x_1-x_4, x_2-x_4, x_3-x_4 和 x_4 的积分即可验证式 (2.6.44) 的正确性.

将式 (2.6.39) 代入式 (2.6.44), 易得

$$\Gamma^{(0)}_{\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4}(p_1,p_2;p_3,p_1+p_2-p_3)=V_{\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4}(\underline{p}_1-\underline{p}_3)-V_{\gamma_1\gamma_2\gamma_4\gamma_3}(\underline{p}_1-\underline{p}_4) \tag{2.6.45}$$

该式的逆傅里叶变换为

$$\begin{aligned}\Gamma^{(0)}_{\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4}(x_1x_2,x_3x_4)=&\int\frac{\mathrm{d}^4p_1}{(2\pi)^4}\frac{\mathrm{d}^4p_2}{(2\pi)^4}\frac{\mathrm{d}^4p_3}{(2\pi)^4}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}[p_1(x_1-x_4)+p_2(x_2-x_4)-p_3(x_3-x_4)]}\\ &\cdot\Gamma^{(0)}_{\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4}(p_1,p_2;p_3,p_1+p_2-p_3)\end{aligned} \tag{2.6.46}$$

利用 $\Gamma^{(0)}$ 的傅里叶分量作为空心方框顶角的贡献, 在动量表象中其他图形规则无论对真空图 S 还是对格林函数都分别与前面对应的规则一样.

例如, 基态能的一级修正 $\Delta E^{0^{(1)}}$ 在 Hugenholtz 表象中的图形仅有一个, 该图 (图 2.6.12(a)) 有一个等价对, 并且有两个费米圈, 故

$$-\mathrm{i}\Delta E^0T=(-\mathrm{i})(-1)^2\frac{1}{2}\int\frac{\mathrm{d}^4p}{(2\pi)^4}\frac{\mathrm{d}^4q}{(2\pi)^4}\Gamma^{(0)}_{\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4}(pq,pq)\mathrm{i}G^0_{\gamma_3\gamma_1}(p)\mathrm{i}G^0_{\gamma_4\gamma_2}(q) \tag{2.6.47}$$

而格林函数的一级修正 $\mathrm{i}G^{(1)}$ 的 Hugenholtz 图为 2.6.12(b), 该图无等价对, 有一个费米圈, 故

$$\mathrm{i}G^{(1)}_{\alpha\beta}(p)=(-\mathrm{i})(-1)\mathrm{i}G^0_{\alpha\gamma_1}(p)\mathrm{i}G^0_{\gamma_3\beta}(p)\int\frac{\mathrm{d}^4q}{(2\pi)^4}\Gamma^{(0)}_{\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4}(pq,pq)\mathrm{i}G^0_{\gamma_4\gamma_2}(q)\tag{2.6.48}$$

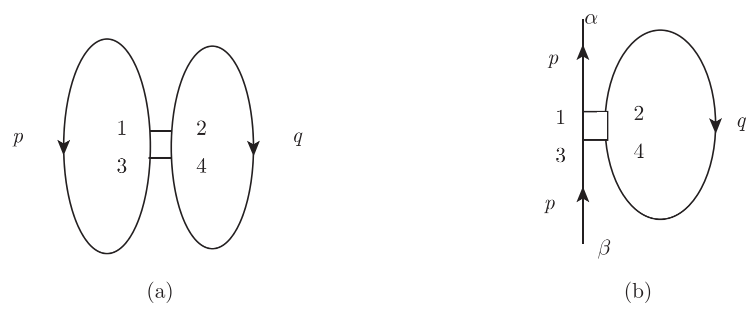


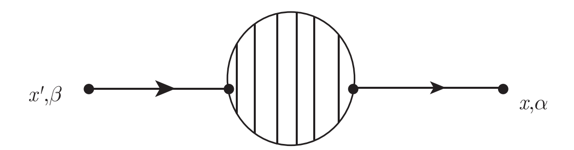
图 2.6.12　一阶真空图与格林函数图

第七节　自能函数及其物理内涵

格林函数的图形技术可以借助于Dyson方程以一种紧致而简明的方式表达出来.

一、Dyson 方程

由格林函数的费曼规则可知, 除自由传播子外, 格林函数 $\mathrm{i}G_{\alpha\beta}(x,x')$ 的任何一个费曼图都有如下形式:



图形中的阴影部分是与两个外传播子相连的连通图. 我们把这一部分叫 "**自能部分**", 若用 $\tilde{\Sigma}$ 代表所有自能部分的和, 则坐标空间中的完全 (或准确) 格林函数如图 2.7.1 所示.

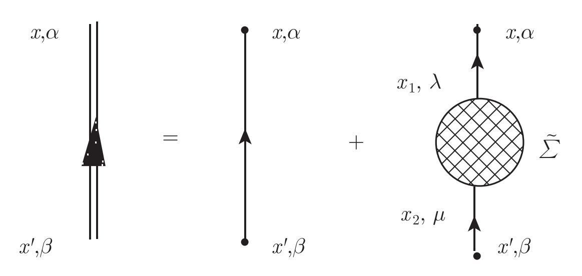


图 2.7.1　完全格林函数

图 2.7.1 中, 双线表示完全格林函数, 细线表示自由传播子, 阴影部分表示所有自能部分的和：$\tilde{\Sigma}$. 该图可以写成如下的解析表达式：

$$\mathrm{i}G = \mathrm{i}G^0 + \mathrm{i}G^0(-\mathrm{i}\tilde{\Sigma})\mathrm{i}G^0$$

或

$$G = G^0 + G^0\tilde{\Sigma}G^0 \tag{2.7.1}$$

这里我们采用了**广义爱因斯坦求和规约**以及**自旋坐标的广义矩阵记号**(参见附录 7A.1⟨2⟩), 即它表示

$$G_{\alpha\beta}(x,x') = G^0_{\alpha\beta}(x,x') + \int \mathrm{d}^4x_1\mathrm{d}^4x_2 G^0_{\alpha\lambda}(x,x_1)\tilde{\Sigma}_{\lambda\mu}(x_1,x_2)G^0_{\mu\beta}(x_2,x') \tag{2.7.2}$$

一个自能部分, 若不能通过截断一条内部的自由传播子而分成两个自能部分, 则称为 “**正规自能部分**”, 也常称为 “**不可约自能部分**”. 它是 “**1 粒子不可约**” 的. 例如, 图 2.7.2(a) 和 (b) 中的自能是非正规自能, 而图 2.7.2(c) 和 (d) 中的自能就是正规自能.

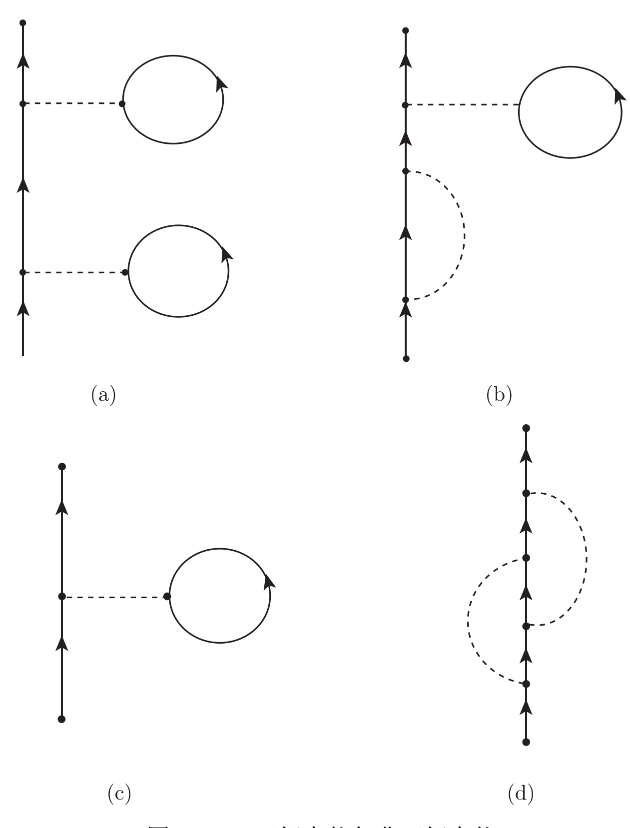


图 2.7.2　正规自能与非正规自能

我们将所有正规自能的和记为 Σ, 称为 "**完全正规自能**" 或 "**质量算符**". 显然, 所有自能部分的和 $\tilde{\Sigma}$ 是一切正规自能及非正规自能的和, 任何非正规自能又总可以用一根或若干根自由传播子将一些正规自能单串而成. 所以 $\tilde{\Sigma}$ 总可以写成

$$\tilde{\Sigma} = \Sigma + \Sigma G^0 \Sigma + \Sigma G^0 \Sigma G^0 \Sigma + \cdots \tag{2.7.3}$$

相应的完全格林函数可以表示为

$$\begin{aligned} G &= G^0 + G^0 \tilde{\Sigma} G^0 = G^0 + G^0 \Sigma G^0 + G^0 \Sigma G^0 \Sigma G^0 + \cdots \\ &= G^0 + G^0 \Sigma (G^0 + G^0 \Sigma G^0 + \cdots) \end{aligned}$$

所以有

$$G = G^0 + G^0 \Sigma G \tag{2.7.4}$$

这就是所谓的 **Dyson 方程**. 在坐标空间中, Dyson 方程实际上是一个积分方程:

$$G_{\alpha\beta}(x, x') = G^0_{\alpha\beta}(x, x') + \int \mathrm{d}^4 x_1 \mathrm{d}^4 x_2 G^0_{\alpha\lambda}(x, x_1) \Sigma_{\lambda\mu}(x_1, x_2) G_{\mu\beta}(x_2, x') \tag{2.7.5}$$

用图形表示如图 2.7.3 所示.

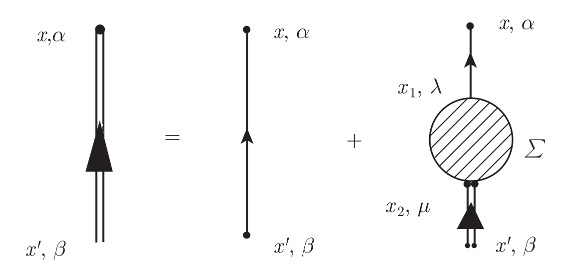


图 2.7.3 Dyson 方程的图形表示

式 (2.7.4) 又可以写成如下形式:

$$G = \frac{1}{(G^0)^{-1} - \Sigma} \tag{2.7.6}$$

对于具有时空平移不变性的体系, 则可定义 Σ 的傅里叶变换为

$$\Sigma(x, x') = \int \frac{\mathrm{d}^4 p}{(2\pi)^4} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}p\cdot(x-x')} \Sigma(p) \tag{2.7.7}$$

代入式 (2.7.5) 中就可得出 Dyson 方程 (2.7.4) 在动量空间中的表达形式:

$$G_{\alpha\beta}(p) = G^0_{\alpha\beta}(p) + G^0_{\alpha\lambda}(p) \Sigma_{\lambda\mu}(p) G_{\mu\beta}(p) \tag{2.7.8}$$

其图形表示为图 2.7.4.

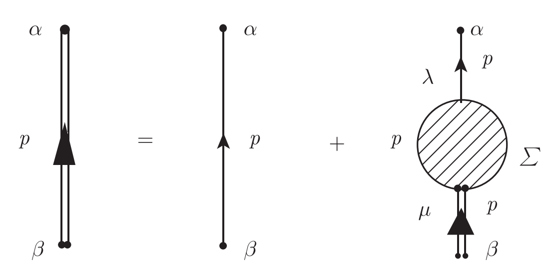


图 2.7.4　动量空间中的 Dyson 方程

由于图 2.7.4 中没有内动量, 所以动量空间中的 Dyson 方程实际上是一个代数方程. 要注意的是, Dyson 方程 (2.7.4) 也可以写成

$$G = G^0 + G\Sigma G^0 \tag{2.7.9}$$

的形式. 从而在图 2.7.3 和图 2.7.4 中, 双线和细线的位置可以互换.

对于前面所讨论的零温费米子体系, 有

$$\mathrm{i}G^0_{\alpha\beta}(p) = \frac{\mathrm{i}\delta_{\alpha\beta}}{\omega - \varepsilon^0_p + \mathrm{i}0^+\mathrm{sgn}(|\underline{p}| - p_\mathrm{F})}$$

另外, 在两体相互作用势与自旋无关的情形, 自能也是对角的:

$$\Sigma_{\alpha\beta}(p) = \Sigma(p)\delta_{\alpha\beta} \tag{2.7.10}$$

代入式 (2.7.6) 得

$$\mathrm{i}G_{\alpha\beta}(p) = \frac{\mathrm{i}\delta_{\alpha\beta}}{\omega - \varepsilon^0_p - \Sigma(p)} \tag{2.7.11}$$

其中, 由于 Σ 的虚部一般不为零, 所以 $\mathrm{i}0^+\mathrm{sgn}(|\underline{p}| - p_\mathrm{F})$ 可以被忽略. 这样求解完全格林函数的问题就归结为求完全正规自能 $\Sigma(p)$, 而 $\Sigma(p)$ 的图形数目一般远少于格林函数的图形数目.

例　H-F 近似下的零温费米体系的自能, 其图形如图 2.7.5 所示.

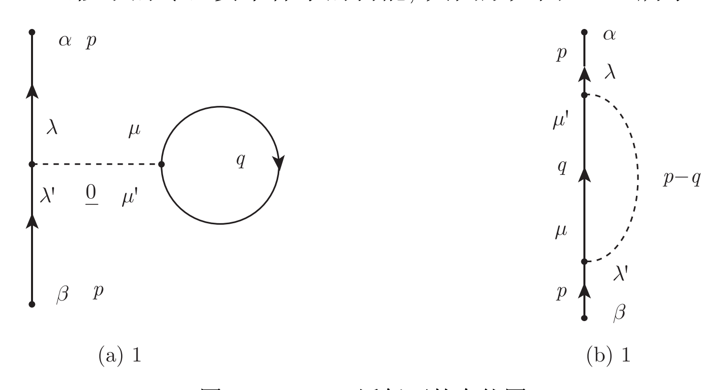


图 2.7.5　H-F 近似下的自能图

解　根据格林函数的动量空间的费曼规则, 不难得知

$$-\mathrm{i}\Sigma^{(\mathrm{a})}_{\lambda\lambda'}(p) = (-\mathrm{i})\int \frac{\mathrm{d}^3q\mathrm{d}\omega}{(2\pi)^4}U_{\lambda\mu,\lambda'\mu'}(\underline{0})(-1)\mathrm{i}G^0_{\mu'\mu}(q)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\cdot\eta} \tag{2.7.12}$$

其中, 等式右边积分号外面的 $-\mathrm{i}$ 是出于一阶展开式的缘故. 再利用关系式

$$\begin{aligned}\int \frac{\mathrm{d}q^0}{2\pi}G^0_{\mu'\mu}(q)\mathrm{e}^{\mathrm{i}q^0\cdot\eta} &= \int \frac{\mathrm{d}q^0}{2\pi}\frac{\delta_{\mu'\mu}}{q^0 - \dfrac{\underline{q}^2}{2m} + \mathrm{i}0^+\mathrm{sgn}(|\underline{q}| - q_\mathrm{F})}\mathrm{e}^{\mathrm{i}q^0\cdot\eta} \\ &= \mathrm{i}\delta_{\mu'\mu}\theta(q_\mathrm{F} - |\underline{q}|)\end{aligned} \tag{2.7.13}$$

代入式 (2.7.12) 中得

$$\Sigma^{(\mathrm{a})}_{\lambda\lambda'}(p) = \int_{|\underline{q}|<q_\mathrm{F}} \frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^3}U_{\lambda\mu,\lambda'\mu}(\underline{0}) \tag{2.7.14}$$

对于图 2.7.5(b), 有

$$-\mathrm{i}\Sigma^{(\mathrm{b})}_{\lambda\lambda'}(p) = (-\mathrm{i})\int \frac{\mathrm{d}^3q\mathrm{d}q^0}{(2\pi)^4}U_{\lambda\mu,\mu'\lambda'}(p-q)\mathrm{i}G^0_{\mu'\mu}(q)\mathrm{e}^{\mathrm{i}q^0\cdot\eta}$$

$$\Sigma^{(\mathrm{b})}_{\lambda\lambda'}(p) = -\int_{|\underline{q}|<q_\mathrm{F}} \frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^3}U_{\lambda\mu,\mu\lambda'}(p-q) \tag{2.7.15}$$

由此得出

$$\Sigma^{(\mathrm{HF})}_{\lambda\lambda'}(p) = \int_{|\underline{q}|<q_\mathrm{F}} \frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^3}\left[U_{\lambda\mu,\lambda'\mu}(\underline{0}) - U_{\lambda\mu,\mu\lambda'}(p-q)\right] \tag{2.7.16}$$

二、自能的物理内涵

自能具有重要的物理意义和丰富的物理内涵. 我们仍以零温费米子体系为例来说明.

(1) 无相互作用格林函数 (即自由传播子) 和相互作用格林函数 (即完全格林函数) 之间的区别可借助于自能来表述. 由于

$$\mathrm{i}G^0_{\alpha\beta}(p) = \frac{\mathrm{i}\delta_{\alpha\beta}}{\omega - \varepsilon^0_p + \mathrm{i}0^+\mathrm{sgn}(|\underline{p}| - p_\mathrm{F})} \tag{2.7.17}$$

$$\mathrm{i}G_{\alpha\beta}(p) = \frac{\mathrm{i}\delta_{\alpha\beta}}{\omega - \varepsilon^0_p - \Sigma(p)} \tag{2.7.18}$$

由此比较, 可看出所有的多体物理实际上包含于自能 Σ 中.

(2) Σ 的图形是 1 粒子不可约的, 因而 (不可约) 自能的图形数目一般远少于格林函数的图形数目. 从图形技术的观点来看, 这导致自能的计算比格林函数的计算更简单方便, 且一旦计算出了自能也就直接确定出了格林函数.

(3) 现在我们来研究格林函数的极点的物理意义, 进而了解自能在极点处的物理内涵.

首先来看自由传播子式 (2.7.17), 它的傅里叶频率变换为

$$G^0(\underline{p},t)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\frac{1}{\omega-\varepsilon_p^0+\mathrm{i}0^+\mathrm{sgn}(|\underline{p}|-p_\mathrm{F})} \tag{2.7.19}$$

(a) 在 $|\underline{p}|>p_\mathrm{F}$ 情形, 自由传播子的极点只在下半平面. 显然由残数定理可知

$$G^0(\underline{p},t)=-\mathrm{i}\theta(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon_p^0 t} \tag{2.7.20}$$

注意：这里 t 的真正含义是 $t-t'$ (因按定义已取 $t'=0$ 了). 因此根据本章第四节可知, $G^0(\underline{p},t)$ 描述的是一个有确定能量 ε_p^0 和动量 $\underline{p}$ 的自由电子从 t' 到 t 的传播而无任何阻尼. 这点也可从自由电子的谱函数 (2.4.52) 上分析得出. 因 $|\underline{p}|>p_\mathrm{F}$ 意味着 $\omega>\mu\equiv\varepsilon_\mathrm{F}$, 故

$$\rho_0^+(\underline{p},\omega-\varepsilon_\mathrm{F})=-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}G^0(\underline{p},\omega)=\delta(\omega-\varepsilon_p^0) \tag{2.7.21}$$

这说明自由电子的谱函数在 ω-ρ_0^+ 平面上是一个宽度为零的尖峰, 峰的中心位于 $\omega=\varepsilon_p^0$ 处, 这表明这是一个有确定能量 ε_p^0 和无限长寿命 (宽度的倒数) 的稳定电子态.

(b) 类似可讨论 $|\underline{p}|<p_\mathrm{F}$ 情形. 此时是逆时传播 $(t-t'<0)$, 可理解成空穴的传播, 它同样具有确定的能量且传播过程无阻尼.

现在来看完全传播子, 因

$$G(\underline{p},\omega)=\frac{1}{[\omega-\varepsilon_p^0-\mathrm{Re}\varSigma(\underline{p},\omega)]-\mathrm{i}\mathrm{Im}\varSigma(\underline{p},\omega)} \tag{2.7.22}$$

(i) 当 $\omega>\mu$ 时, 谱函数

$$\begin{aligned}\rho^+(\underline{p},\omega-\mu)&=-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}G(\underline{p},\omega)\\&=-\frac{1}{\pi}\frac{\mathrm{Im}\varSigma(\underline{p},\omega)}{[\omega-\varepsilon_p^0-\mathrm{Re}\varSigma(\underline{p},\omega)]^2+[\mathrm{Im}\varSigma(\underline{p},\omega)]^2}\end{aligned} \tag{2.7.23}$$

由式 (2.4.48) 可知, $\rho^+(\underline{p},\omega-\mu)>0$, 故此时有 $\mathrm{Im}\varSigma(\underline{p},\omega)<0$. 若自能是小量, 则式 (2.7.23) 对应了一个中心在

$$\varepsilon_p^*=\varepsilon_p^0+\mathrm{Re}\varSigma(\underline{p},\varepsilon_p^*) \tag{2.7.24}$$

的洛伦兹型函数, ε_p^* 称为**重整化能量**. 在这一点附近展开:

$$\omega-\varepsilon_p^0-\mathrm{Re}\varSigma(\underline{p},\omega)=\omega-\varepsilon_p^0-\left[\mathrm{Re}\varSigma(\underline{p},\varepsilon_p^*)+\frac{\partial\mathrm{Re}\varSigma(\underline{p},\omega)}{\partial\omega}|_{\omega=\varepsilon_{p}*}(\omega-\varepsilon_p*)\right]$$

$$= (\omega - \varepsilon_p*) \left[1 - \frac{\partial \mathrm{Re}\Sigma(\underline{p}, \omega)}{\partial \omega}|_{\omega=\varepsilon_p*}\right] \equiv (\omega - \varepsilon_p*) Z_p^{-1} \quad (2.7.25)$$

故在重整化能量附近有

$$G(\underline{p}, \omega) = \frac{Z_p}{\omega - \varepsilon_p * + \mathrm{i}\gamma_p*} \quad (2.7.26)$$

其中

$$\gamma_p* = -Z_p \mathrm{Im}\Sigma(\underline{p}, \varepsilon_p*) \quad (2.7.27)$$

式中, Z_p 为波函数重整化常数. 对式 (2.7.26) 作傅里叶频率变换, 得

$$G(\underline{p}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi} \frac{Z_p}{\omega - \varepsilon_p * + \mathrm{i}\gamma_p*} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} = -\mathrm{i}Z_p\theta(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon_p*t - \gamma_p*t} \quad (2.7.28)$$

这说明在 $t = 0$ 时刻加上一个电子后的态的传播像一个能量为 ε_p* 的准粒子, 且它在传播过程中会按 $\mathrm{e}^{-\gamma_p*t}$ 规律而随时间衰减, 可定义粒子寿命τ 为

$$\tau = \frac{1}{2\gamma_p*} \quad (2.7.29)$$

其中, γ_p* 常称为衰变宽度, 它的大小与谱函数 ρ^+ 的 “宽度” 相联系.

(ii) 当 $\omega < \mu$ 时, 可类似处理. 此时 $\mathrm{Im}\Sigma(\underline{p}, \omega) > 0$. 准粒子将是逆时传播, 而这又可看成准空穴的传播, 且准空穴的能量和寿命都和准电子一样描述.

总之, 自能的实部给出了单粒子的能量修正 (**激发谱**), 而自能的虚部给出了衰变宽度 (其倒数即粒子寿命).

(4) 一旦求出了自能, 就可以给出准粒子的有效质量. 事实上, 按照有效质量 $(m*)$ 的定义, 有

$$\varepsilon_p = \varepsilon_p^0 + \Sigma(p) \equiv \frac{p^2}{2m*} \quad (2.7.30)$$

在费米面附近的**有效质量**$m*$ 由下式给出:

$$\left.\frac{\partial \varepsilon_p}{\partial |\underline{p}|}\right|_{p_\mathrm{F}} = \frac{p_\mathrm{F}}{m*} \quad (2.7.31)$$

(5) 由式 (2.4.52) 可知

$$\begin{aligned} &\mathrm{Im}\Sigma(\underline{p}, \omega) \leqslant 0 \quad (\omega > \mu) \\ &\mathrm{Im}\Sigma(\underline{p}, \omega) \geqslant 0 \quad (\omega < \mu) \end{aligned} \quad (2.7.32)$$

这样, 自能的不连续点给出了体系的化学势.

(6) 一旦求出了自能, 可直接给出体系的基态能量移动密度. 事实上由式 (2.4.35) 可知, 有

$$\frac{E_0 - W_0}{V} = \pm\frac{1}{2}\mathrm{i}\int_0^1 \frac{\mathrm{d}\lambda}{\lambda} \int \frac{\mathrm{d}^4 p}{(2\pi)^4} \mathrm{e}^{\mathrm{i}p^0\eta} \Sigma^\lambda(p) \mathrm{tr} G^\lambda(p) \quad (2.7.33)$$

(7) 自能指定了一个粒子被一个由全同粒子组成的复合粒子散射的**光学势**.

参见文献 (Negele J W, Orland H. Quantum Many-Particle Systems. §5.3. Addison-Wesley Publishing Company, 1988).

第八节　应用：电子气模型

一、电子气模型

电子气模型可用于描述金属中的电子, 这些电子之间有瞬时库仑相互作用, 并且假设金属中原本分离分布的正电荷离子可看成均匀分布的正电荷背景. 正因为如此, 该模型又常被称为 "**凝胶模型**".

该模型中的相互作用有三种：

(1) 电子–电子瞬时库仑相互作用, 它的费曼图表示如下：

$$V_{\alpha\beta,\alpha'\beta'}(x,y)=\frac{\delta_{\alpha\alpha'}\delta_{\beta\beta'}e^2}{|\underline{x}-\underline{y}|} \tag{2.8.1}$$

(2) 电子–背景相互作用：

$$-\frac{e\cdot \mathrm{en}\delta_{\alpha\alpha'}}{|\underline{x}-\underline{y}|} \tag{2.8.2}$$

其中, $\otimes$ 代表正电荷背景; en 为正电荷密度.

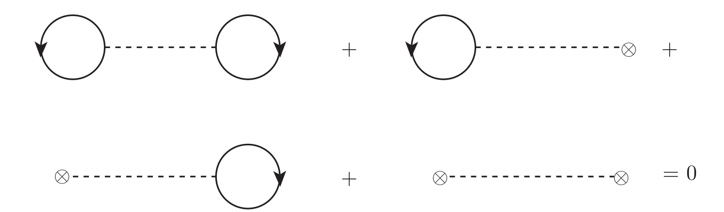
(3) 背景–背景相互作用:

$$\frac{e^2n^2}{|\underline{x}-\underline{y}|} \tag{2.8.3}$$

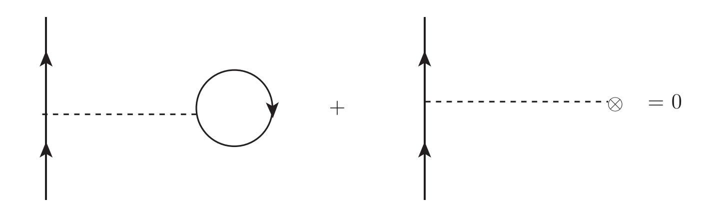
均匀正电荷背景的引入一方面可使体系满足总电荷为零的要求, 另一方面可消除无穷大静库仑势；但静止的均匀正电荷背景对电子的能量–动量的任何改变都不会做出贡献. 借助于费曼图可知, 正电荷背景的唯一效应是消除所谓的 "蝌蚪图" 项的贡献. 事实上, 注意到

$$\mathrm{i}G_{\alpha\beta}(x,x)=-n\delta_{\alpha\beta}/2 \quad\Rightarrow\quad (\text{loop at } x)=-n \tag{2.8.4}$$

由此可知在基态能量的改变中, 应有如下子图, 且其总贡献为零：



而在自能贡献中, 应有如下子图, 其总贡献也为零:



这是基于 $\otimes$ 提供一个 $+n$ 的贡献, 它和闭合费米圈贡献刚好相反的缘故.

根据以上所述可知, **电子气模型的费曼规则**与前面讨论的零温费米体系的费曼规则基本相同, 只需要去除所有含蝌蚪图的图形, 而相互作用顶角的贡献采用式 (2.8.1). 在动量表象中, 相互作用顶角的贡献为

$$V_{\alpha\beta,\alpha'\beta'}(\underline{p}) = U_{\alpha\beta,\alpha'\beta'}(\underline{p}) = \frac{4\pi\delta_{\alpha\alpha'}\delta_{\beta\beta'}e^2}{|\underline{p}|^2} \tag{2.8.5}$$

二、H-F 近似

在 H-F 近似下, 对基态能量密度改变的贡献的费曼图只有一个, 如图 2.8.1 所示.

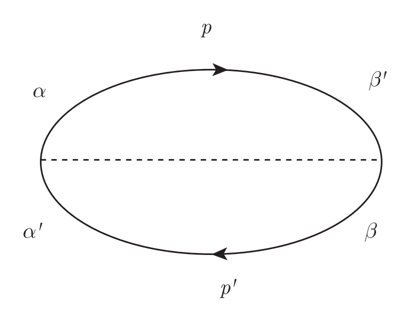


图 2.8.1 H-F 近似下的真空图

利用式 (2.6.31), 有

$$\Delta\varepsilon^{(\mathrm{HF})} = -\frac{1}{2}\int_{|\underline{p}|<p_{\mathrm{F}}} \frac{\mathrm{d}^3 p}{(2\pi)^3}\int_{|\underline{p}'|<p_{\mathrm{F}}} \frac{\mathrm{d}^3 p'}{(2\pi)^3} U_{\alpha\beta,\beta\alpha}(p'-p)$$

$$= -4\pi e^2 \int_{|\underline{p}|<p_{\mathrm{F}}} \frac{\mathrm{d}^3 p}{(2\pi)^3} \int_{|\underline{p}'|<p_{\mathrm{F}}} \frac{\mathrm{d}^3 p'}{(2\pi)^3} \frac{1}{|\underline{p}'-\underline{p}|^2}$$

令 $\underline{k} = \underline{p}/p_{\mathrm{F}}$, $\underline{k}' = \underline{p}'/p_{\mathrm{F}}$, 并注意 $|\underline{k}|, |\underline{k}'| < 1$, 则

$$\Delta\varepsilon^{(\mathrm{HF})} = -4\pi e^2 p_{\mathrm{F}}^4 \int_{|\underline{k}|<1} \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} \int_{|\underline{k}'|<1} \frac{\mathrm{d}^3 k'}{(2\pi)^3} \frac{1}{|\underline{k}-\underline{k}'|^2} = -\mathrm{const}\cdot e^2 p_{\mathrm{F}}^4 \tag{2.8.6}$$

其中, 可算出 $\mathrm{const} = 1/(4\pi^3)$. 把它与零阶近似下 (即无互作用下) 的基态能量密度移动 $\varepsilon^0(\varepsilon^0 = 2p_{\mathrm{F}}^5/(20\pi^2 m))$ 进行比较, 可以看出在高密度极限下 $(p_{\mathrm{F}} \gg e^2 m)$, 式 (2.8.6) 中的 $\Delta\varepsilon$ 可以忽略不计, 即相互作用能对基态能量密度移动的贡献可不必考虑.

由于不考虑蝌蚪图, H-F 自能图仅需考虑图 2.8.2.

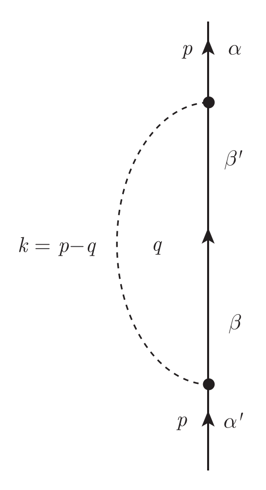


图 2.8.2　H-F 近似下的自能图

由式 (2.7.16) 可知

$$\Sigma_{\alpha\alpha'}^{(\mathrm{HF})}(p) = -\int_{|\underline{q}|<p_{\mathrm{F}}} \frac{\mathrm{d}^3 q}{(2\pi)^3} U_{\alpha\beta,\beta\alpha'}(p-q) = -\int_{|\underline{q}|<p_{\mathrm{F}}} \frac{\mathrm{d}^3 q}{(2\pi)^3} \frac{4\pi e^2 \delta_{\alpha\beta}\delta_{\beta\alpha'}}{|\underline{p}-\underline{q}|^2}$$

$$= -\frac{4\pi e^2 \delta_{\alpha\alpha'}}{(2\pi)^3} \int_0^{p_{\mathrm{F}}} 2\pi \underline{q}^2 \mathrm{d}|\underline{q}| \int_{-1}^{1} \mathrm{d}(\cos\theta) \frac{1}{\underline{p}^2 + \underline{q}^2 - 2|\underline{p}||\underline{q}|\cos\theta}$$

$$= -2\tilde{\alpha}\delta_{\alpha\alpha'} \left(\frac{p_{\mathrm{F}}^2 - \underline{p}^2}{|\underline{p}|} \ln\left| \frac{p_{\mathrm{F}} + |\underline{p}|}{p_{\mathrm{F}} - |\underline{p}|} \right| + 2p_{\mathrm{F}} \right) \tag{2.8.7}$$

其中, $\tilde{\alpha} = e^2/(4\pi)$.

显然, 在 H-F 近似下, 自能是实的, 因而单粒子态是稳定的；且此时激发谱为

$$E(p)=\frac{\underline{p}^2}{2m}+\Sigma(p)=\frac{\underline{p}^2}{2m}-2\tilde{\alpha}\left(\frac{p_{\mathrm{F}}^2-\underline{p}^2}{|\underline{p}|}\ln\left|\frac{p_{\mathrm{F}}+|\underline{p}|}{p_{\mathrm{F}}-|\underline{p}|}\right|+2p_{\mathrm{F}}\right) \tag{2.8.8}$$

由此可求出在费米面附近的有效质量 $m*$:

$$m*=\frac{p_{\mathrm{F}}}{\left.\dfrac{\partial E(p)}{\partial|\underline{p}|}\right|_{p_{\mathrm{F}}}} \tag{2.8.9}$$

因

$$\frac{\partial E(p)}{\partial|\underline{p}|}=\frac{|\underline{p}|}{m}+2\tilde{\alpha}\left(\frac{p_{\mathrm{F}}^2+\underline{p}^2}{|\underline{p}|^2}\ln\left|\frac{p_{\mathrm{F}}+|\underline{p}|}{p_{\mathrm{F}}-|\underline{p}|}\right|-2\frac{p_{\mathrm{F}}}{|\underline{p}|}\right)$$

它在 $|\underline{p}|\to p_{\mathrm{F}}$ 时趋于无穷大. 故在费米面处, $m*\to 0$. 显然所有金属中电子的有效质量都为零是一个错误的结论. 事实上 $m*\to 0$, 有一些可观测的结果, 金属或者成为超导体或者成为磁体, 低温下比热也将发散. 而这种错误是由于 Hartree-Fock 近似忽略了极化所产生的屏蔽效应.

三、极化和屏蔽

电场不能传进金属内部, 电子之间的有效势不是由长程库仑力给出的. 事实上它由屏蔽势给出, 而基态极化会产生屏蔽势.

屏蔽势由相互作用顶角图与所有极化图之和产生.

最低阶极化图及其贡献如图 2.8.3 所示.

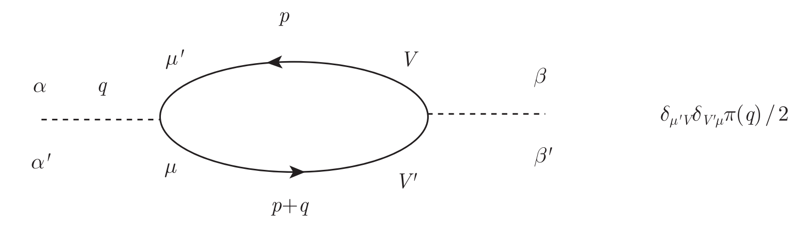


图 2.8.3 最低阶极化图

图 2.8.3 中

$$\begin{aligned}\pi(q)=&2(-\mathrm{i})(-1)\int\frac{\mathrm{d}^4p}{(2\pi)^4}\frac{\mathrm{i}}{p_0-\dfrac{\underline{p}^2}{2m}+\mathrm{i}0^+\mathrm{sgn}(|\underline{p}|-p_{\mathrm{F}})}\\&\cdot\frac{\mathrm{i}}{(p_0+q_0)-\dfrac{(\underline{p}+\underline{q})^2}{2m}+\mathrm{i}0^+\mathrm{sgn}(|\underline{p}+\underline{q}|-p_{\mathrm{F}})}\end{aligned} \tag{2.8.10}$$

其中, 右端系数 -1 来自于一个费米圈, 系数 2 是为了后面的方便.

用 $U_{\text{eff}}(q)_{\alpha\beta,\alpha'\beta'}$ 代表有效势, $\tilde{\Pi}(q)_{\mu\nu,\mu'\nu'}$ 代表所有极化图之和. 类似完全格林函数情形, 有

$$U_{\text{eff}}(q)_{\alpha\beta,\alpha'\beta'} = U(q)_{\alpha\beta,\alpha'\beta'} + U(q)_{\alpha\mu,\alpha'\mu'}\tilde{\Pi}(q)_{\mu\nu,\mu'\nu'}U(q)_{\nu\beta,\nu'\beta'} \tag{2.8.11}$$

$\tilde{\Pi}(q)_{\mu\nu,\mu'\nu'}$ 的图形也分为可约极化部分和不可约极化部分. 不可约极化图形是不能通过切断一条相互作用线而分为两个不相连部分的图形, 其总和记为 Π, 如图 2.8.4 所示.

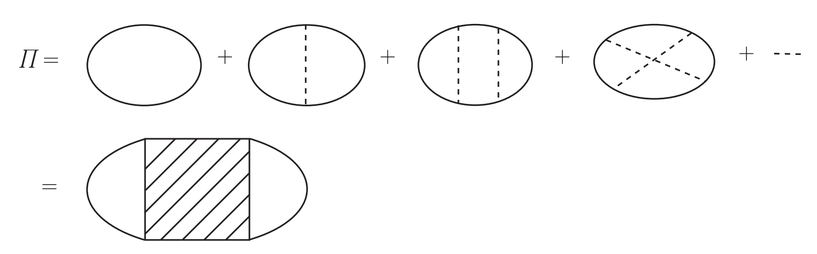
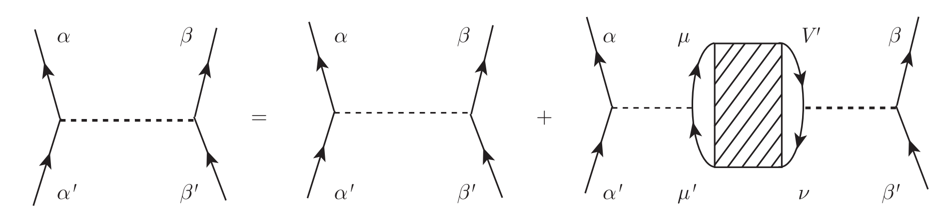


图 2.8.4　不可约极化部分

借助于不可约极化部分, **有效势的方程**可写为

$$U_{\text{eff}}(q)_{\alpha\beta,\alpha'\beta'} = U(q)_{\alpha\beta,\alpha'\beta'} + U(q)_{\alpha\mu,\alpha'\mu'}\Pi(q)_{\mu\nu,\mu'\nu'}U_{\text{eff}}(q)_{\nu\beta,\nu'\beta'} \tag{2.8.12}$$

其图形表示为



若相互作用势与自旋无关, 即

$$U(q)_{\alpha\beta,\alpha'\beta'} = \delta_{\alpha\alpha'}\delta_{\beta\beta'}U(q) \tag{2.8.13}$$

则有效势可写为

$$U_{\text{eff}}(q)_{\alpha\beta,\alpha'\beta'} = \delta_{\alpha\alpha'}\delta_{\beta\beta'}U_{\text{eff}}(q) \tag{2.8.14}$$

代入式 (2.8.12) 得

$$U_{\text{eff}}(q) = \frac{U(q)}{1 - U(q)\Pi(q)} \tag{2.8.15}$$

其中, $\Pi(q) \equiv \Pi(q)_{\mu\nu,\mu\nu}$.

定义**广义介电函数**$\varepsilon(q)$ 为

$$U_{\text{eff}}(q) \equiv \frac{U(q)}{\varepsilon(q)} \tag{2.8.16}$$

它代表了介质极化对粒子相互作用势的屏蔽. 只要求出了不可约极化部分, 就可求出 $\varepsilon(q)$:

$$\varepsilon(q) = 1 - U(q)\mathit{\Pi}(q) \tag{2.8.17}$$

下面给出在**链近似**下计算有效势的例子. 这种近似是只需取图 2.8.4 中的**最低阶极化图**$\pi(q)$ 来作为不可约极化部分 $\mathit{\Pi}$ 的近似. 这意味着有效势由如图 2.8.5 所示极化图之和产生.

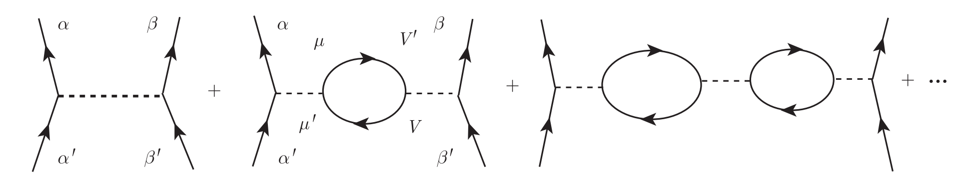


图 2.8.5　链近似下的有效势

因而在链近似下的有效势为

$$U_{\text{eff}}(q) = \frac{U(q)}{1 - U(q)\pi(q)} = \frac{4\pi e^2}{\underline{q}^2 - 4\pi e^2 \pi(q)} \tag{2.8.18}$$

下面仅考虑静态情形 ($q_0 = 0$):

$$\begin{aligned}\pi(q) =& 2\mathrm{i}\int \frac{\mathrm{d}^4 p}{(2\pi)^4} \frac{\mathrm{i}}{p_0 - \dfrac{\underline{p}^2}{2m} + \mathrm{i}0^+\operatorname{sgn}(|\underline{p}| - p_{\mathrm{F}})} \\ &\cdot \frac{\mathrm{i}}{p_0 - \dfrac{(\underline{p}+\underline{q})^2}{2m} + \mathrm{i}0^+\operatorname{sgn}(|\underline{p}+\underline{q}| - p_{\mathrm{F}})}\end{aligned}$$

由其极点分布可知, 仅下列两种情形的极点分布才有非零贡献.

Im p_0

$\dfrac{(\underline{p}+\underline{q})^2}{2m} + \mathrm{i}\varepsilon$

Re p_0

ε_{F}

$\dfrac{\underline{p}^2}{2m} - \mathrm{i}\varepsilon$

$$\begin{cases} |\underline{p}| > p_{\mathrm{F}} \\ |\underline{p}+\underline{q}| < p_{\mathrm{F}} \end{cases}$$

Im p_0 $\dfrac{\underline{p}^2}{2m}+\mathrm{i}\varepsilon$ Re p_0 ε_{F} $\dfrac{(\underline{p}+\underline{q})^2}{2m}-\mathrm{i}\varepsilon$

$$\begin{cases}|\underline{p}|<p_{\mathrm{F}}\\ |\underline{p}+\underline{q}|>p_{\mathrm{F}}\end{cases}$$

故

$$\begin{aligned}\pi(q)=&2\mathrm{i}\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}\int\frac{\mathrm{d}p_0}{2\pi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_00^-}\left[\frac{\mathrm{i}\theta(p_{\mathrm{F}}-|\underline{p}|)}{p_0-\dfrac{\underline{p}^2}{2m}-\mathrm{i}\varepsilon}\cdot\frac{\mathrm{i}\theta(|\underline{p}+\underline{q}|-p_{\mathrm{F}})}{p_0-\dfrac{(\underline{p}+\underline{q})^2}{2m}+\mathrm{i}\varepsilon}\right.\\&\left.+\frac{\mathrm{i}\theta(|\underline{p}|-p_{\mathrm{F}})}{p_0-\dfrac{\underline{p}^2}{2m}+\mathrm{i}\varepsilon}\cdot\frac{\mathrm{i}\theta(p_{\mathrm{F}}-|\underline{p}+\underline{q}|)}{p_0-\dfrac{(\underline{p}+\underline{q})^2}{2m}-\mathrm{i}\varepsilon}\right]\\=&2\mathrm{i}(2\pi\mathrm{i})\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}\frac{1}{2\pi}\left[\frac{-\theta(p_{\mathrm{F}}-|\underline{p}|)\theta(|\underline{p}+\underline{q}|-p_{\mathrm{F}})}{\dfrac{\underline{p}^2}{2m}-\dfrac{(\underline{p}+\underline{q})^2}{2m}}\right.\\&\left.+\frac{-\theta(|\underline{p}|-p_{\mathrm{F}})\theta(p_{\mathrm{F}}-|\underline{p}+\underline{q}|)}{\dfrac{(\underline{p}+\underline{q})^2}{2m}-\dfrac{\underline{p}^2}{2m}}\right]\end{aligned}\tag{2.8.19}$$

由式 (2.8.19) 可知, $\pi(q)$ 是实的, 且其中两项的贡献相等, 积分后得

$$\pi(q)=-\frac{mp_{\mathrm{F}}}{2\pi^2}\left[1-\frac{p_{\mathrm{F}}}{|\underline{q}|}\left(1-\frac{\underline{q}^2}{4p_{\mathrm{F}}^2}\right)\ln\left|\frac{p_{\mathrm{F}}-|\underline{q}|/2}{p_{\mathrm{F}}+|\underline{q}|/2}\right|\right]\tag{2.8.20}$$

当 $\underline{q}\to 0$ 时, 有

$$\pi(0)=-\frac{mp_{\mathrm{F}}}{2\pi^2}\left[1-\frac{p_{\mathrm{F}}}{|\underline{q}|}\cdot 1\cdot 2\cdot\left(-\frac{|\underline{q}|}{2p_{\mathrm{F}}}\right)\right]=-\frac{mp_{\mathrm{F}}}{\pi^2}\tag{2.8.21}$$

这样

$$U_{\mathrm{eff}}(q)_{\alpha\beta,\alpha'\beta'}\approx\delta_{\alpha\alpha'}\delta_{\beta\beta'}\frac{4\pi e^2}{\underline{q}^2-\lambda^2}\tag{2.8.22}$$

$$\lambda^2=4\pi e^2\pi(0)=16\tilde{\alpha}mp_{\mathrm{F}}\tag{2.8.23}$$

其中, $\tilde{\alpha}\equiv e^2/(4\pi)$ 为精细结构常数. 在坐标空间中, 式 (2.8.22) 给出一个汤川势:

$$U_{\mathrm{eff}}(r)_{\alpha\beta,\alpha'\beta'}=\delta_{\alpha\alpha'}\delta_{\beta\beta'}\frac{e^2}{r}\mathrm{e}^{-\lambda r}\tag{2.8.24}$$

由此可见在电子气中的电子看到的只是屏蔽库仑势 (汤川势), 有了屏蔽势的计算可导致非零的有效质量 $m*$.

四、无规相近似

无规相近似又称为**环图近似**. 我们首先在这种近似下计算电子气的基态能, 它对应的图形如图 2.8.6 所示.

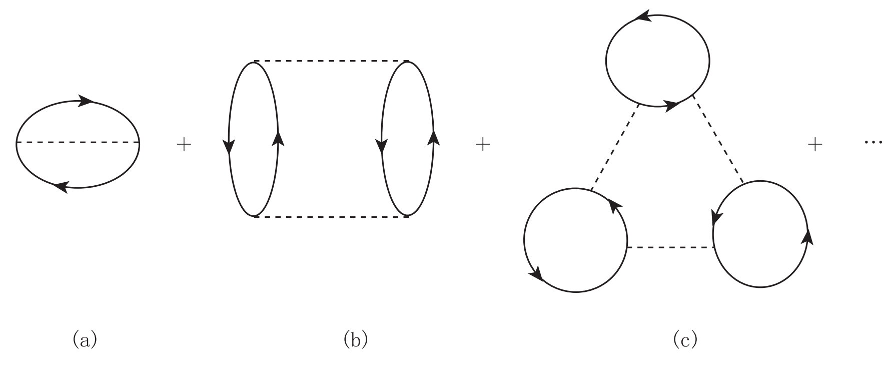


图 2.8.6 环图近似下的真空图

它的特点是从一个费米圈到另一个费米圈的动量传递都是相同的. 这时会遇到同样的 $\pi(q)$, 但却遇到一个对称因子 $1/S$, 其中, $S=2\times$ 胞的数目.

图 2.8.6(a) 给出基态能 $\varepsilon_{\mathrm{a}}^{0}$ 为

$$\varepsilon_{\mathrm{a}}^{0}=\mathrm{i}\frac{1}{2}\int\frac{\mathrm{d}^4q}{(2\pi)^4}U(q)\pi(q)\tag{2.8.25}$$

同样对图 2.8.6(b) 和 (c) 的基态能有

$$\varepsilon_{\mathrm{b}}^{0}=\mathrm{i}\frac{1}{4}\int\frac{\mathrm{d}^4q}{(2\pi)^4}[U(q)\pi(q)]^2\tag{2.8.26}$$

$$\varepsilon_{\mathrm{c}}^{0}=\mathrm{i}\frac{1}{6}\int\frac{\mathrm{d}^4q}{(2\pi)^4}[U(q)\pi(q)]^3\tag{2.8.27}$$

用幂次计数法很容易判断, 当 $q\to 0$ 时, $\varepsilon_{\mathrm{a}}^{0}$ 是有限的, 但 $\varepsilon_{\mathrm{b}}^{0}$ 和 $\varepsilon_{\mathrm{c}}^{0}$ 却分别是表观对数发散和平方发散的. 然而考虑所有环图的贡献, 其总和却是有限的.

$$\begin{aligned}\varepsilon^{0}&=\varepsilon_{\mathrm{a}}^{0}+\varepsilon_{\mathrm{b}}^{0}+\varepsilon_{\mathrm{c}}^{0}+\cdots\\&=-\frac{1}{2}\int\frac{\mathrm{d}^4q}{(2\pi)^4}\ln[1-U(q)\pi(q)]\end{aligned}\tag{2.8.28}$$

物理上这也是来自于屏蔽效应的.

在无规相近似下, 计算自能的环图可以表示为图 2.8.7.

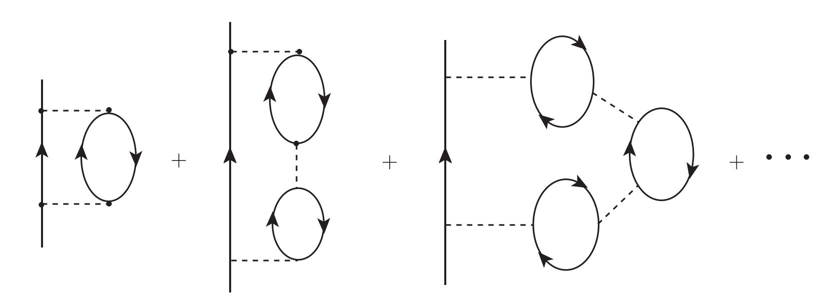


图 2.8.7　环图近似下的自能

这里不再给出其具体表达式.

附录 2A　Gell-Mann Low 定理的证明

我们从 $\hat{H}_0$ 的一个本征态 $|\Phi_0\rangle$ 开始非常慢地加上相互作用 $\lambda\hat{H}'$, 使得 $|\Phi_0\rangle$ 能绝热地演化成有相互作用时的完全哈密顿的一个本征态 $|\Psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle$. 为此可以方便地参数化这种施加相互作用的方式为

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'_\varepsilon = \hat{H}_0 + \lambda\mathrm{e}^{-\varepsilon|t|}\hat{H}' \tag{2A.1}$$

其中, ε 是一个很小的正数. 当 $t\to\pm\infty$ 时, $\hat{H}\to\hat{H}_0$, 而当 $t\to 0$ 时, 得到了有相互作用时的系统的哈密顿. 在计算完成后取极限 $\varepsilon\to 0$.

将绝热演化时的时间演化算符记为 $\hat{S}_\varepsilon(t,t_0)$:

$$\hat{S}_\varepsilon(t,t_0) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-\mathrm{i})^n}{n!}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_1\mathrm{d}t_2\cdots\mathrm{d}t_n\hat{T}[\hat{H}'_{\varepsilon I}(t_1)\cdots\hat{H}'_{\varepsilon I}(t_n)] \tag{2A.2}$$

设 $\hat{H}_0$ 的本征值为 E_0, 由于

$$\begin{aligned}(\hat{H}_0-E_0)\hat{S}_\varepsilon(0,-\infty)|\Phi_0\rangle &= [\hat{H}_0,\hat{S}_\varepsilon(0,-\infty)]|\Phi_0\rangle\\ &= \sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-\mathrm{i})^n}{n!}\int_{-\infty}^{0}\mathrm{d}t_1\mathrm{d}t_2\cdots\mathrm{d}t_n\mathrm{e}^{\varepsilon(t_1+\cdots+t_n)}(-\mathrm{i})\\ &\quad\cdot\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial}{\partial t_i}\hat{T}[\lambda\hat{H}'_{\mathrm{I}}(t_1)\lambda\hat{H}'_{\mathrm{I}}(t_2)\cdots\lambda\hat{H}'_{\mathrm{I}}(t_n)]|\Phi_0\rangle\end{aligned}$$

这里利用了海森伯运动方程, 再利用分部积分公式 (包括边界项) 并注意 $\hat{H}'_{\mathrm{I}}(t_i=0)=\hat{H}'$, 则得

$$(\hat{H}_0-E_0)\hat{S}_\varepsilon(0,-\infty)|\Phi_0\rangle = -\lambda\hat{H}'\hat{S}_\varepsilon(0,-\infty)|\Phi_0\rangle + \mathrm{i}\varepsilon\lambda\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}\hat{S}_\varepsilon(0,-\infty)|\Phi_0\rangle \tag{2A.3}$$

注意到

$$\mathrm{i}\varepsilon\lambda\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}\frac{|\varPsi_\varepsilon^{(\mathrm{H})}\rangle}{\langle\varPhi_0|\varPsi_\varepsilon^{(\mathrm{H})}\rangle}=\mathrm{i}\varepsilon\lambda\frac{1}{\langle\varPhi_0|\varPsi_\varepsilon^{(\mathrm{H})}\rangle}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}|\varPsi_\varepsilon^{(\mathrm{H})}\rangle-\frac{\mathrm{i}\varepsilon\lambda|\varPsi_\varepsilon^{(\mathrm{H})}\rangle}{\langle\varPhi_0|\varPsi_\varepsilon^{(\mathrm{H})}\rangle^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}\langle\varPhi_0|\varPsi_\varepsilon^{(\mathrm{H})}\rangle$$

两端左乘 $\langle\varPhi_0|$ 可导出

$$\mathrm{i}\varepsilon\lambda\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}|\varPsi_\varepsilon^{(\mathrm{H})}\rangle=\langle\varPhi_0|\varPsi_\varepsilon^{(\mathrm{H})}\rangle\mathrm{i}\varepsilon\lambda\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}\frac{|\varPsi_\varepsilon^{(\mathrm{H})}\rangle}{\langle\varPhi_0|\varPsi_\varepsilon^{(\mathrm{H})}\rangle}+|\varPsi_\varepsilon^{(\mathrm{H})}\rangle\frac{\langle\varPhi_0|\lambda\hat{H}'|\varPsi_\varepsilon^{(\mathrm{H})}\rangle}{\langle\varPhi_0|\varPsi_\varepsilon^{(\mathrm{H})}\rangle}$$

由于在 $t=0$ 计算的相互作用表象算符等于对应的薛定谔表象的算符. 故由式 (2A.3) 可得

$$[\hat{H}_0+\lambda\hat{H}'-E_\varepsilon]\frac{|\varPsi_\varepsilon^{(\mathrm{H})}\rangle}{\langle\varPhi_0|\varPsi_\varepsilon^{(\mathrm{H})}\rangle}=\mathrm{i}\varepsilon\lambda\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}\frac{|\varPsi_\varepsilon^{(\mathrm{H})}\rangle}{\langle\varPhi_0|\varPsi_\varepsilon^{(\mathrm{H})}\rangle} \tag{2A.4}$$

其中

$$E_\varepsilon=E_0+\frac{\langle\varPhi_0|\lambda\hat{H}'|\varPsi_\varepsilon^{(\mathrm{H})}\rangle}{\langle\varPhi_0|\varPsi_\varepsilon^{(\mathrm{H})}\rangle}$$

由于我们已假设在微扰论中当 $\lambda=1$ 时, 极限 $\lim\limits_{\varepsilon\to0}\dfrac{|\varPsi_\varepsilon^{(\mathrm{H})}\rangle}{\langle\varPhi_0|\varPsi_\varepsilon^{(\mathrm{H})}\rangle}$ 存在. 故式 (2A.4) 说明 $\dfrac{|\varPsi_0^{(\mathrm{H})}\rangle}{\langle\varPhi_0|\varPsi_0^{(\mathrm{H})}\rangle}$ 的确是 $\hat{H}_0+\hat{H}'$ 的本征态且本征值为 $E_0+\dfrac{\langle\varPhi_0|\hat{H}'|\varPsi_0^{(\mathrm{H})}\rangle}{\langle\varPhi_0|\varPsi_0^{(\mathrm{H})}\rangle}$.

附录 2B 式 (2.4.45) 的证明

对于有空间平移不变性的无限体系, 还可作进一步的傅里叶动量变换. 由于此时动量是守恒量, 所以前面所选的完全集可以选为能量和动量的共同本征态集合. 由于总动量算符可写为

$$\underline{\hat{P}}=\int\mathrm{d}^3x\hat{\psi}_\alpha^+(\underline{x})(-\mathrm{i}\boldsymbol{\nabla})\hat{\psi}_\alpha(\underline{x})$$

故有

$$\boldsymbol{\nabla}\hat{\psi}_\alpha(\underline{x})=\mathrm{i}[\underline{\hat{P}},\hat{\psi}_\alpha(\underline{x})]$$

由此可以验证

$$\hat{\psi}_\alpha(\underline{x})=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\underline{\hat{P}}\cdot\underline{x}}\hat{\psi}_\alpha(\underline{0})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{\hat{P}}\cdot\underline{x}}$$

从而

$$\begin{aligned}&\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|\hat{\psi}_\alpha(\underline{x})|\psi_n^{N+1}\rangle\langle\psi_n^{N+1}|\hat{\psi}_\beta^+(\underline{x}')|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle\\=&\mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{P}_n^{N+1}\cdot(\underline{x}-\underline{x}')}\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|\hat{\psi}_\alpha(\underline{0})|\psi_n^{N+1}\rangle\langle\psi_n^{N+1}|\hat{\psi}_\beta^+(\underline{0})|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle\end{aligned}$$

这里我们已设基态的总动量为零. 类似地有

$$
\begin{aligned}
&\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|\hat{\psi}_\beta^+(\underline{x}')|\psi_n^{N-1}\rangle\langle\psi_n^{N-1}|\hat{\psi}_\alpha(\underline{x})|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle\\
=&\mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{P}_n^{N-1}\cdot(\underline{x}'-\underline{x})}\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|\hat{\psi}_\beta^+(\underline{0})|\psi_n^{N-1}\rangle\langle\psi_n^{N-1}|\hat{\psi}_\alpha(\underline{0})|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle
\end{aligned}
$$

故

$$
\begin{aligned}
G_{\alpha\beta}(\omega;\underline{x},\underline{x}')=&\sum_n \mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{P}_n^{N+1}\cdot(\underline{x}-\underline{x}')}\frac{\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|\hat{\psi}_\alpha(\underline{0})|\psi_n^{N+1}\rangle\langle\psi_n^{N+1}|\hat{\psi}_\beta^+(\underline{0})|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle}{\omega-(\varepsilon_n^{N+1}+\mu)+\mathrm{i}0^+}\\
&\mp\sum_n \mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{P}_n^{N-1}\cdot(\underline{x}'-\underline{x})}\frac{\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|\hat{\psi}_\beta^+(\underline{0})|\psi_n^{N-1}\rangle\langle\psi_n^{N-1}|\hat{\psi}_\alpha(\underline{0})|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle}{\omega+(\varepsilon_n^{N-1}-\mu)-\mathrm{i}0^+}
\end{aligned}
$$

它的傅里叶动量变换为

$$
\begin{aligned}
G_{\alpha\beta}(\omega;\underline{k})\equiv&\int\mathrm{d}^3(x-x')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\underline{k}\cdot(\underline{x}-\underline{x}')}G_{\alpha\beta}(\omega,\underline{x},\underline{x}')\\
=&V\sum_n\delta_{\underline{k},\underline{P}_n^{N+1}}\frac{\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|\hat{\psi}_\alpha(\underline{0})|\psi_n^{N+1}\rangle\langle\psi_n^{N+1}|\hat{\psi}_\beta^+(\underline{0})|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle}{\omega-(\varepsilon_n^{N+1}+\mu)+\mathrm{i}0^+}\\
&\mp V\sum_n\delta_{\underline{k},-\underline{P}_n^{N-1}}\frac{\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|\hat{\psi}_\beta^+(\underline{0})|\psi_n^{N-1}\rangle\langle\psi_n^{N-1}|\hat{\psi}_\alpha(\underline{0})|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle}{\omega+(\varepsilon_n^{N-1}-\mu)-\mathrm{i}0^+}
\end{aligned}
$$

其中, 右边第一项要求 $|\psi_n^{N+1}\rangle$ 的动量 (即 $\underline{P}_n^{N+1}$) 等于 $\underline{k}$, 第二项要求 $|\psi_n^{N-1}\rangle$ 的动量等于 $-\underline{k}$. 故上式可更明显地改写为

$$
\begin{aligned}
G_{\alpha\beta}(\omega;\underline{k})=&V\sum_n\left[\frac{\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|\hat{\psi}_\alpha(\underline{0})|\psi_{n\underline{k}}^{N+1}\rangle\langle\psi_{n\underline{k}}^{N+1}|\hat{\psi}_\beta^+(\underline{0})|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle}{\omega-(\varepsilon_{n\underline{k}}^{N+1}+\mu)+\mathrm{i}0^+}\right.\\
&\left.\mp\frac{\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|\hat{\psi}_\beta^+(\underline{0})|\psi_{n,-\underline{k}}^{N-1}\rangle\langle\psi_{n,-\underline{k}}^{N-1}|\hat{\psi}_\alpha(\underline{0})|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle}{\omega+(\varepsilon_{n,-\underline{k}}^{N-1}-\mu)-\mathrm{i}0^+}\right]
\end{aligned}
$$

最后注意到动量表象中的场算符可写为

$$
\hat{\psi}_\alpha(\underline{x})=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\underline{p}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{p}\cdot\underline{x}}\hat{c}_{\underline{p}\alpha},\quad \hat{\psi}_\alpha(\underline{0})=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\underline{p}}\hat{c}_{\underline{p}\alpha}
$$

代入前面式中得

$$
\begin{aligned}
G_{\alpha\beta}(\omega;\underline{k})=&\sum_n\left[\frac{\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|\hat{c}_{\underline{k}\alpha}|\psi_{n\underline{k}}^{N+1}\rangle\langle\psi_{n\underline{k}}^{N+1}|\hat{c}_{\underline{k}\beta}^+|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle}{\omega-(\varepsilon_{n\underline{k}}^{N+1}+\mu)+\mathrm{i}0^+}\right.\\
&\left.\mp\frac{\langle\psi_0^{(\mathrm{H})}|\hat{c}_{\underline{k}\beta}^+|\psi_{n,-\underline{k}}^{N-1}\rangle\langle\psi_{n,-\underline{k}}^{N-1}|\hat{c}_{\underline{k}\alpha}|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle}{\omega+(\varepsilon_{n,-\underline{k}}^{N-1}-\mu)-\mathrm{i}0^+}\right]
\end{aligned}\tag{2.4.45}
$$

附录 2C　式 (2.6.11) 的证明

可以证明有

$$\begin{aligned}&\langle\varphi_0|\hat{T}[\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}_\beta^+(x')S(\infty,-\infty)]|\varphi_0\rangle\\ =&\langle\varphi_0|\hat{T}[\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}_\beta^+(x')S(\infty,-\infty)]|\varphi_0\rangle_{\mathrm{C}}\times\langle\varphi_0|S(\infty,-\infty)]|\varphi_0\rangle\end{aligned}\tag{2.6.11}$$

从场算符收缩的方式来看有如下方式:

(1) n 阶连通图中的收缩方式. $\hat{\psi}_\alpha(x)$ 要与散射矩阵展开式中某个 $\hat{H}_{\mathrm{int}}$ 中的 $\hat{\psi}^+$ 收缩, 这个 $\hat{H}_{\mathrm{int}}$ 中的 $\hat{\psi}$ 又要与另一个与前面不同的 $\hat{H}_{\mathrm{int}}$ 中的 $\hat{\psi}^+$ 收缩, 依次类推而不空过任何一个 $\hat{H}_{\mathrm{int}}$(其中不同 $\hat{H}_{\mathrm{int}}$ 的数目等于 n), 直到最后一个 $\hat{H}_{\mathrm{int}}$ 中的 $\hat{\psi}$ 与 $\hat{\psi}_\beta^+(x')$ 收缩. 得到的图形就是 n 阶连通图.

(2) 不连通图的收缩方式. 若有一个或者几个 $\hat{H}_{\mathrm{int}}$ 中的场算符未与 $\hat{\psi}_\alpha(x)$、$\hat{\psi}_\beta^+(x')$ 收缩或者没有和与 $\hat{\psi}_\alpha(x)$、$\hat{\psi}_\beta^+(x')$ 有收缩关系的其他 $\hat{H}_{\mathrm{int}}$ 中的场算符收缩, 那么得到的图形就是不连通图.

这样任何一个 n 阶不连通图必然由两个因子组成. 一个因子包含所有与 $\hat{\psi}_\alpha(x)$、$\hat{\psi}_\beta^+(x')$ 发生联系的 $\hat{H}_{\mathrm{int}}$, 另一个因子为不与 $\hat{\psi}_\alpha(x)$、$\hat{\psi}_\beta^+(x')$ 发生联系的部分, 我们将其表述成

$$\begin{aligned}&\frac{(-\mathrm{i})^n}{n!}\int\mathrm{d}t_1\mathrm{d}t_2\cdots\mathrm{d}t_m\langle\varphi_0|\hat{T}\left[\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}_\beta^+(x')\hat{H}_{\mathrm{int}}(t_1)\hat{H}_{\mathrm{int}}(t_2)\cdots\hat{H}_{\mathrm{int}}(t_m)\right]|\varphi_0\rangle_{\mathrm{C}}\\ &\times\int\mathrm{d}t_{m+1}\mathrm{d}t_{m+2}\cdots\mathrm{d}t_n\langle\varphi_0|\hat{T}\left[\hat{H}_{\mathrm{int}}(t_{m+1})\hat{H}_{\mathrm{int}}(t_{m+2})\cdots\hat{H}_{\mathrm{int}}(t_n)\right]|\varphi_0\rangle\end{aligned}$$

注意: n 个 $\hat{H}_{\mathrm{int}}$ 可重新分配于两个平均 $\langle\cdots\rangle_{\mathrm{C}}$ 和 $\langle\cdots\rangle$ 之间, 而得到相同的贡献, 因为这样做等于只是改变积分变量. 故这样使得图形的数目扩大 $\dfrac{n!}{m!(n-m)!}$ 倍, 即将 n 个 $\hat{H}_{\mathrm{int}}$ 分成 m 个和 $(n-m)$ 个 $\hat{H}_{\mathrm{int}}$ 两组组合数. 所有这种图形的总贡献是

$$\begin{aligned}&\frac{(-\mathrm{i})^n}{n!}\int\mathrm{d}t_1\mathrm{d}t_2\cdots\mathrm{d}t_m\langle\varphi_0|\hat{T}\left[\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}_\beta^+(x')\hat{H}_{\mathrm{int}}(t_1)\hat{H}_{\mathrm{int}}(t_2)\cdots\hat{H}_{\mathrm{int}}(t_m)\right]|\varphi_0\rangle_{\mathrm{C}}\\ &\times\frac{n!}{m!(n-m)!}\int\mathrm{d}t_{m+1}\mathrm{d}t_{m+2}\cdots\mathrm{d}t_n\langle\varphi_0|\hat{T}\left[\hat{H}_{\mathrm{int}}(t_{m+1})\hat{H}_{\mathrm{int}}(t_{m+2})\cdots\hat{H}_{\mathrm{int}}(t_n)\right]|\varphi_0\rangle\end{aligned}$$

把包含一定连通部分和任意不连通部分的各级图形的贡献加起来, 得

$$\frac{(-\mathrm{i})^n}{m!}\int\mathrm{d}t_1\mathrm{d}t_2\cdots\mathrm{d}t_m\langle\varphi_0|\hat{T}\left[\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}_\beta^+(x')\hat{H}_{\mathrm{int}}(t_1)\hat{H}_{\mathrm{int}}(t_2)\cdots\hat{H}_{\mathrm{int}}(t_m)\right]|\varphi_0\rangle_{\mathrm{C}}$$

$$
\begin{aligned}
&\times\left\{1-\mathrm{i}\int \mathrm{d}t_{m+1}\langle\varphi_0|\hat{T}\hat{H}_{\mathrm{int}}(t_{m+1})|\varphi_0\rangle\right.\\
&-\frac{1}{2}\int \mathrm{d}t_{m+1}\mathrm{d}t_{m+2}\langle\varphi_0|\hat{T}\hat{H}_{\mathrm{int}}(t_{m+1})\hat{H}_{\mathrm{int}}(t_{m+2})|\varphi_0\rangle+\cdots+\frac{(-\mathrm{i})^k}{k!}\\
&\quad\left.\int \mathrm{d}t_{m+1}\mathrm{d}t_{m+2}\cdots\mathrm{d}t_{m+k}\langle\varphi_0|\hat{T}\hat{H}_{\mathrm{int}}(t_{m+1})\hat{H}_{\mathrm{int}}(t_{m+2})\cdots\hat{H}_{\mathrm{int}}(t_{m+k})|\varphi_0\rangle+\cdots\right\}\\
=&\frac{(-\mathrm{i})^n}{m!}\int \mathrm{d}t_1\mathrm{d}t_2\cdots\mathrm{d}t_m\langle\varphi_0|\hat{T}\left[\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}^+_\beta(x')\hat{H}_{\mathrm{int}}(t_1)\hat{H}_{\mathrm{int}}(t_2)\cdots\hat{H}_{\mathrm{int}}(t_m)\right]|\varphi_0\rangle_{\mathrm{C}}\\
&\times\langle\varphi_0|S(\infty,-\infty)]|\varphi_0\rangle
\end{aligned}
$$

再对 m 求和, 上式就是式 (2.6.11) 右端.

第三章　图形微扰论 (有限温度)

第一节　引　　论

在固体物理的许多情形中, 需要计及温度的效应. 对于相互作用粒子体系, 所有感兴趣的平衡热力学量都可以由巨配分函数Z 算出.

$$Z = \mathrm{tr} \mathrm{e}^{-\beta\left(\hat{H}-\mu\hat{N}\right)} = \mathrm{tr} \mathrm{e}^{-\beta\hat{H}^{\mu}} \tag{3.1.1}$$

其中, tr 表示对体系的任意一组状态的完全集来求迹; $\hat{H}^{\mu} \equiv \hat{H} - \mu\hat{N}$; 逆温$\beta = 1/(k_{\mathrm{B}}T)$, k_{B} 是玻尔兹曼常量; μ 是化学势; $\hat{N}$ 是粒子数算符. 这里为了方便, 考虑巨正则系综, 这样体系可以含有任意粒子数. 巨正则系综描述的是与粒子库及热库相联系的平衡体系.

对于巨正则系综, 它的归一化的密度算符为

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z}\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}^{\mu}} = \mathrm{e}^{\beta(\Omega-\hat{H}^{\mu})} \tag{3.1.2}$$

其中, Ω 是巨正则势(热力学势), 且有 $\mathrm{tr}\hat{\rho} = 1$. 由此可知

$$\Omega = -\beta^{-1}\ln Z \tag{3.1.3}$$

任何算符 $\hat{A}$ 的热力学平均 (系综平均) 是

$$\langle\hat{A}\rangle = \mathrm{tr}(\hat{\rho}\hat{A}) \tag{3.1.4}$$

将化学势、体积和温度的函数 $\Omega(\mu, V, T)$ 作微分并利用式 (3.1.1)∼ 式 (3.1.4), 可得如下热力学关系:

$$N = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial\mu}\right)_{T,V} \tag{3.1.5}$$

$$P = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial V}\right)_{\mu,T} \tag{3.1.6}$$

$$S = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial T}\right)_{V,\mu} = \frac{\Omega - E + \mu N}{T} \tag{3.1.7}$$

其中, N 是粒子数的平均值; P 是体系的压强; S 是熵; E 是内能. 注意到内能 $E(V, S, N)$ 有所谓的 Gibbs-Duhem关系式:

$$E = TS - PV + \mu N \tag{3.1.8}$$

则由式 (3.1.7) 可知

$$\Omega = -PV(= F - \mu N) \tag{3.1.9}$$

知道了 Ω, 借助于 N, 可由式 (3.1.5) 给出 μ, 从而可借助于 V、T 及 N 由式 (3.1.7) 和式 (3.1.6) 找到 S 和 P, 当然也可求出自由能 F.

现在考虑巨配分函数 Z(或巨正则势 Ω) 的计算方法. 首先注意到从零温理论过渡到有限温度理论的关键一步是将实变量 t 用虚变量 $-\mathrm{i}\tau$ 替代, 即

$$t \to -\mathrm{i}\tau \tag{3.1.10}$$

其中, τ 为实数. 借助于这种替代, 我们几乎可以将零温理论中的所有方法和结论都直接推广到有限温度情形. 此外, 若考虑到要采用巨正则系综, 还应对哈密顿作进一步替代:

$$\hat{H} \to \hat{H}^{\mu}, \quad \hat{H}_0 \to \hat{H}_0^{\mu} \equiv \hat{H}_0 - \mu\hat{N} \tag{3.1.11}$$

其中

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$$

我们可把第二章中的绘景理论推广为

薛定谔绘景中:

$$|\psi(\tau)\rangle = \mathrm{e}^{-(\tau-\tau_0)\hat{H}^{\mu}}|\psi(\tau_0)\rangle$$

海森伯绘景中:

$$\hat{A}(\tau) = \mathrm{e}^{(\tau-\tau_0)\hat{H}^{\mu}}\hat{A}\mathrm{e}^{-(\tau-\tau_0)\hat{H}^{\mu}}$$

相互作用绘景中:

$$|\psi_{\mathrm{I}}(\tau)\rangle = \mathrm{e}^{(\tau-\tau_0)\hat{H}_0^{\mu}}|\psi(\tau)\rangle$$

$$\hat{A}_{\mathrm{I}}(\tau) = \mathrm{e}^{(\tau-\tau_0)\hat{H}_0^{\mu}}\hat{A}\mathrm{e}^{-(\tau-\tau_0)\hat{H}_0^{\mu}} \tag{3.1.12}$$

特别地, 相互作用绘景中的时间演化算符 $S(t,t_0)$ 推广为

$$S(t,t_0) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(t-t_0)\hat{H}_0}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(t-t_0)\hat{H}} \to S(\tau,\tau_0) = \mathrm{e}^{(\tau-\tau_0)\hat{H}_0^{\mu}}\mathrm{e}^{-(\tau-\tau_0)\hat{H}^{\mu}} \tag{3.1.13}$$

此时, 态的演化关系为

$$|\psi_{\mathrm{I}}(\tau)\rangle = S(\tau,\tau_0)|\psi_{\mathrm{I}}(\tau_0)\rangle \tag{3.1.14}$$

但必须注意, $S(\tau,\tau_0)$ 虽然同样有传递性, 却不再是幺正算符了. 它的运动方程以及初始条件为

$$\begin{cases} \dfrac{\partial}{\partial\tau}S(\tau,\tau_0) = -\hat{H}_{\mathrm{I}}'(\tau)S(\tau,\tau_0) \\ S(\tau_0,\tau_0) = 1 \end{cases} \tag{3.1.15}$$

其中, $\hat{H}'_{\rm I}$ 与前面一样是相互作用哈密顿, $\hat{H}'_{\rm I}(\tau)={\rm e}^{(\tau-\tau_0)\hat{H}_0^{\mu}}\hat{H}'{\rm e}^{-(\tau-\tau_0)\hat{H}_0^{\mu}}$. 式 (3.1.15) 的解为

$$S(\tau,\tau_0)=T{\rm e}^{-\int_{\tau_0}^{\tau}{\rm d}\tau'\hat{H}'_{\rm I}(\tau')} \tag{3.1.16}$$

其中, T 是对 τ 来进行编时的, 以后通常不加指出地取 $\tau_0=0$. 以上结果为我们提供了巨配分函数的微扰展开, 因为能把巨配分函数与相互作用表象中的时间演化算符相联系. 由式 (3.1.13) 知

$$S(\beta,0)={\rm e}^{\beta\hat{H}_0^{\mu}}{\rm e}^{-\beta\hat{H}^{\mu}} \tag{3.1.17}$$

故

$$Z={\rm tre}^{-\beta\hat{H}^{\mu}}={\rm tr}\left[{\rm e}^{-\beta\hat{H}_0^{\mu}}S(\beta,0)\right]={\rm tre}^{-\beta\hat{H}_0^{\mu}}\frac{{\rm tr}\left[{\rm e}^{-\beta\hat{H}_0^{\mu}}S(\beta,0)\right]}{{\rm tre}^{-\beta\hat{H}_0^{\mu}}}$$

其中, ${\rm tre}^{-\beta\hat{H}_0^{\mu}}=Z_0$ 是无相互作用系综的巨配分函数. 这样

$$Z=Z_0\langle S(\beta,0)\rangle_0 \tag{3.1.18}$$

即

$$\frac{Z}{Z_0}=\left\langle T{\rm e}^{-\int_0^{\beta}{\rm d}\tau\hat{H}'_{\rm I}(\tau)}\right\rangle_0 \tag{3.1.19}$$

其中, 系综平均 $\langle\cdots\rangle_0$ 是用无相互作用系综的密度算符 $\hat{\rho}_0=\dfrac{{\rm e}^{-\beta\hat{H}_0^{\mu}}}{Z_0}=\dfrac{{\rm e}^{-\beta\hat{H}_0^{\mu}}}{{\rm tre}^{-\beta\hat{H}_0^{\mu}}}$ 来进行的. 由此知巨正则势满足

$$\varOmega-\varOmega_0=-\beta^{-1}\ln\left\langle T{\rm e}^{-\int_0^{\beta}{\rm d}\tau\hat{H}'_{\rm I}(\tau)}\right\rangle_0 \tag{3.1.20}$$

其中, $\varOmega_0=-\beta^{-1}\ln Z_0$, 式 (3.1.20) 按 $\hat{H}'_{\rm I}$ 的幂次的微扰展开提供了有限温度费曼图技术的基础.

第二节 有限温度格林函数

一、定义及性质

首先给出在任意表象中都适用的格林函数的定义.

设 $\hat{\psi}_{\lambda}(\tau)$ 和 $\hat{\psi}_{\lambda}\equiv\hat{\psi}_{\lambda}(\tau=0)$ 为场算符, 其中, λ 是泛指表征体系状态的 “广义” 指标, 例如, 当 λ 代表自旋 α, 动量 $\underline{p}$ 时, 有 $\hat{\psi}_{\underline{p},\alpha}(\tau)\equiv\hat{c}_{\underline{p}\alpha}(\tau)$. 在坐标表象下还可以代表空间坐标 $\underline{x}$ 等. 特别是当 λ 中有连续指标时, 我们常更方便地将连续指标写进括号内. 例如, $\hat{\psi}_{\underline{x},\alpha}(\tau)\equiv\hat{\psi}_{\alpha}(\underline{x}\tau)$, $\hat{\psi}_{\underline{x},\alpha}\equiv\hat{\psi}_{\alpha}(\underline{x})$ 等.

松原函数(又称温度格林函数) 定义为

$$g_{\lambda\lambda'}(\tau,\tau') = -\langle T\hat{\psi}_\lambda(\tau)\hat{\psi}^+_{\lambda'}(\tau')\rangle = -\mathrm{tr}\left\{\hat{\rho}T\left[\hat{\psi}_\lambda(\tau)\hat{\psi}^+_{\lambda'}(\tau')\right]\right\} \tag{3.2.1}$$

其中, $\hat{\rho} = \mathrm{e}^{\beta(\varOmega-\hat{H}^\mu)}$; $\hat{\psi}_\lambda(\tau) = \mathrm{e}^{\hat{H}^\mu\tau}\hat{\psi}_\lambda\mathrm{e}^{-\hat{H}^\mu\tau}$; $\hat{\psi}^+_\lambda(\tau) = \mathrm{e}^{\hat{H}^\mu\tau}\hat{\psi}^+_\lambda\mathrm{e}^{-\hat{H}^\mu\tau}$. 上述定义中由于式 (3.2.1) 的右端可写成

$$-\mathrm{tr}\left\{\hat{\rho}\left[\theta(\tau-\tau')\mathrm{e}^{\hat{H}^\mu(\tau-\tau')}\hat{\psi}_\lambda\mathrm{e}^{-\hat{H}^\mu(\tau-\tau')}\hat{\psi}^+_{\lambda'} \pm \theta(\tau'-\tau)\mathrm{e}^{-\hat{H}^\mu(\tau-\tau')}\hat{\psi}^+_{\lambda'}\mathrm{e}^{\hat{H}^\mu(\tau-\tau')}\hat{\psi}_\lambda\right]\right\}$$

故松原函数可写成 $\tau-\tau'$ 的函数:

$$g_{\lambda\lambda'}(\tau,\tau') \equiv g_{\lambda\lambda'}(\tau-\tau') \tag{3.2.2}$$

根据上述符号的约定可知, 当 $\lambda = \underline{x},\alpha$ 时, 松原函数可写为 $g_{\alpha\beta}(\underline{x},\tau;\underline{x}',\tau') \equiv g_{\alpha\beta}(\underline{x},\underline{x}';\tau-\tau')$, 对于均匀体系, 还可写成 $g_{\alpha\beta}(\underline{x}-\underline{x}';\tau-\tau')$; 当 $\lambda = \underline{p},\alpha$ 时, 松原函数可写为 $g_{\alpha\beta}(\underline{p},\underline{p}';\tau-\tau')$, 对于均匀体系, 还有 $g_{\alpha\beta}(\underline{p},\underline{p}';\tau-\tau') = \delta_{\underline{p}\,\underline{p}'}g_{\alpha\beta}(\underline{p};\tau-\tau')$. 特别地, 对于相互作用与自旋无关的体系, 则有

$$g_{\alpha\beta}(\cdots) = \delta_{\alpha\beta}g(\cdots) \tag{3.2.3}$$

松原函数还具有如下性质.

(1) **周期性或反周期性**.

考虑 $-\beta<\tau<0$, 则有

$$\begin{aligned}
g_{\lambda\lambda'}(\tau) &= \pm\langle\hat{\psi}^+_{\lambda'}(0)\hat{\psi}_\lambda(\tau)\rangle = \pm\mathrm{tr}\left[\mathrm{e}^{\beta(\varOmega-\hat{H}^\mu)}\hat{\psi}^+_{\lambda'}\mathrm{e}^{\tau\hat{H}^\mu}\psi_\lambda\mathrm{e}^{-\tau\hat{H}^\mu}\right]\\
&= \pm\mathrm{tr}\left[\mathrm{e}^{\tau\hat{H}^\mu}\hat{\psi}_\lambda\mathrm{e}^{-\tau\hat{H}^\mu}\mathrm{e}^{\beta(\varOmega-\hat{H}^\mu)}\hat{\psi}^+_{\lambda'}\right] = \pm\mathrm{tr}\left[\mathrm{e}^{\beta\varOmega}\mathrm{e}^{\tau\hat{H}^\mu}\hat{\psi}_\lambda\mathrm{e}^{-(\tau+\beta)\hat{H}^\mu}\hat{\psi}^+_{\lambda'}\right]\\
&= \pm\mathrm{tr}\left[\mathrm{e}^{\beta(\varOmega-\hat{H}^\mu)}\mathrm{e}^{(\tau+\beta)\hat{H}^\mu}\hat{\psi}_\lambda\mathrm{e}^{-(\tau+\beta)\hat{H}^\mu}\hat{\psi}^+_{\lambda'}\right] = \pm\langle\hat{\psi}_\lambda(\tau+\beta)\hat{\psi}^+_{\lambda'}(0)\rangle\\
&= \pm\langle T\hat{\psi}_\lambda(\tau+\beta)\hat{\psi}^+_{\lambda'}(0)\rangle
\end{aligned}$$

故有

$$g_{\lambda\lambda'}(\tau) = \pm g_{\lambda\lambda'}(\tau+\beta) \tag{3.2.4}$$

其中, 对于费米场算符, 式 (3.2.4) 中取负号. 这种周期性或反周期性可以推广到无穷区间. 由于这种性质, 我们以后只需将 τ 的变化区间取为 $[0,\beta]$.

(2) **傅里叶变换与松原频率**.

由松原函数的周期性及反周期性, 可以借助于分离的 "**松原频率**" 来进行其傅里叶变换. 松原频率定义为

$$\omega_n = \frac{2n\pi}{\beta} \quad (\text{玻色子情形}) \tag{3.2.5}$$

$$\omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta} \quad (\text{费米子情形}) \tag{3.2.6}$$

则有傅里叶变换

$$g_{\lambda\lambda'}(\tau) = \frac{1}{\beta}\sum_n \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_n\tau} g_{\lambda\lambda'}(\mathrm{i}\omega_n) \tag{3.2.7}$$

$$g_{\lambda\lambda'}(\mathrm{i}\omega_n) = \int_0^\beta \mathrm{d}\tau \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n\tau} g_{\lambda\lambda'}(\tau) \tag{3.2.8}$$

不难验证如上引入的松原频率可满足松原函数的周期性或反周期性的要求.

(3) **不连续性**.

由式 (3.2.1) 直接可以得知 $g_{\lambda\lambda'}(\tau)$ 在 $\tau = 0$ 处有一跃变. 事实上有

$$[g_{\lambda\lambda'}(\tau) - g_{\lambda\lambda'}(-\tau)]_{\tau=0} = -\delta_{\lambda\lambda'} \tag{3.2.9}$$

注意: 根据我们前面对指标的约定, 对坐标表象中的松原函数, 上式应理解为

$$[g_{\alpha\beta}(\underline{x}-\underline{x}';\tau) - g_{\alpha\beta}(\underline{x}-\underline{x}';-\tau)]_{\tau=0} = -\delta_{\alpha\beta}\delta^3(\underline{x}-\underline{x}') \tag{3.2.10}$$

其中, α, β 是 λ, λ' 中除去空间坐标后的其他量子数, 例如, 在电子情形, 它们是自旋指标.

在相互作用绘景中, 与零温情形类似有

$$\begin{aligned} g_{\lambda\lambda'}(\tau,\tau') &= -\frac{\left\langle T\left[\hat{\psi}_{\lambda\mathrm{I}}(\tau)\hat{\psi}^+_{\lambda'\mathrm{I}}(\tau')S(\beta,0)\right]\right\rangle_0}{\langle S(\beta,0)\rangle_0} \\ &= -\left\langle T\left[\hat{\psi}_\lambda(\tau)\hat{\psi}^+_{\lambda'}(\tau')S(\beta,0)\right]\right\rangle_0^{(\mathrm{C})} \end{aligned} \tag{3.2.11}$$

其中, $\langle\cdots\rangle^{(\mathrm{C})}$ 表示仅考虑所有连通图. 式 (3.2.11) 最后一个式子中, 我们省略了指标 I.

二、自由粒子的松原函数

下面利用定义 (3.2.1) 来计算自由粒子的松原函数 $g^0_{\alpha\alpha'}(\underline{x},\underline{x}';\tau-\tau')$. 此时系统的能量可借助于单粒子能量 ε^0_p 表达为

$$\hat{H}^\mu = \hat{H}^\mu_0 = \sum_{\underline{p}} (\varepsilon^0_p - \mu)\hat{a}^+_{\underline{p}\alpha}\hat{a}_{\underline{p}\alpha} \tag{3.2.12}$$

利用统计物理中的基本关系式:

$$\langle \hat{a}^+_{\underline{p}\alpha}\hat{a}_{\underline{p}'\alpha'}\rangle_0 = \delta_{\underline{p}\,\underline{p}'}\delta_{\alpha\alpha'}n^0_{\underline{p}} \tag{3.2.13}$$

其中, $\langle\cdots\rangle_0$ 表示应该用 $\hat{\rho}_0$ 来求平均;

$$n^0_{\underline{p}} = \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon^0_p - \mu)} \mp 1} \tag{3.2.14}$$

式中, 右端的正负号的取法是: 玻色统计取负号, 费米统计取正号. 由此知

$$\langle \hat{a}_{\underline{p}'\alpha'} \hat{a}^+_{\underline{p}\alpha} \rangle_0 = \delta_{\underline{p}\,\underline{p}'} \delta_{\alpha\alpha'} (1 \pm n^0_{\underline{p}}) \tag{3.2.15}$$

再将自由粒子的场算符展开式 (参见式 (2.5.4)、式 (2.5.5)、式 (3.1.10) 及式 (3.1.11)):

$$\hat{\psi}_\alpha(\underline{x}, \tau) = \int \frac{\mathrm{d}^3 p}{(2\pi)^{3/2}} \mathrm{e}^{-(\varepsilon^0_p - \mu)\tau + \mathrm{i}\underline{p}\cdot\underline{x}} \hat{a}_{\underline{p}\alpha} \tag{3.2.16}$$

$$\hat{\psi}^+_\alpha(\underline{x}, \tau) = \int \frac{\mathrm{d}^3 p}{(2\pi)^{3/2}} \mathrm{e}^{(\varepsilon^0_p - \mu)\tau - \mathrm{i}\underline{p}\cdot\underline{x}} \hat{a}^+_{\underline{p}\alpha} \tag{3.2.17}$$

代入式 (3.2.1), 不过要将此时的平均理解为 $\langle\cdots\rangle_0$, 得

$$\begin{aligned} g^0_{\alpha\alpha'}(\tau - \tau'; \underline{x}, \underline{x}') = &- \delta_{\alpha\alpha'} \int \frac{\mathrm{d}^3 p}{(2\pi)^3} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{p}\cdot(\underline{x} - \underline{x}') - (\varepsilon^0_p - \mu)(\tau - \tau')} \\ &\cdot \left[\theta(\tau - \tau')(1 \pm n^0_{\underline{p}}) \pm \theta(\tau' - \tau) n^0_{\underline{p}}\right] \end{aligned} \tag{3.2.18}$$

由此可知, 自由粒子体系的松原函数仅是 $\underline{x} - \underline{x}'$ 和 $\tau - \tau'$ 的函数, $g^0_{\alpha\alpha'}(\underline{x}, \underline{x}'; \tau - \tau') = g^0_{\alpha\alpha'}(\underline{x} - \underline{x}'; \tau - \tau')$, 这是时空均匀性的结果. 此外, 由于它对于自旋空间是对角的, 所以可引入无自旋指标的 $g^0(\underline{x} - \underline{x}'; \tau - \tau')$:

$$g^0_{\alpha\alpha'}(\underline{x} - \underline{x}'; \tau - \tau') = \delta_{\alpha\alpha'} g^0(\underline{x} - \underline{x}'; \tau - \tau') \tag{3.2.19}$$

其中

$$\begin{aligned} g^0(\underline{x} - \underline{x}'; \tau - \tau') = &- \int \frac{\mathrm{d}^3 p}{(2\pi)^3} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{p}\cdot(\underline{x} - \underline{x}') - (\varepsilon^0_p - \mu)(\tau - \tau')} \\ &\cdot \left[\theta(\tau - \tau')(1 \pm n^0_{\underline{p}}) \pm \theta(\tau' - \tau) n^0_{\underline{p}}\right] \end{aligned} \tag{3.2.20}$$

特别地, 当 $\tau' = \tau^+$ 时, 有

$$g^0(\underline{x} - \underline{x}'; 0^-) = \mp \int \frac{\mathrm{d}^3 p}{(2\pi)^3} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{p}\cdot(\underline{x} - \underline{x}')} n^0_{\underline{p}} \tag{3.2.21}$$

当 $\tau' = \tau^+$ 并且 $\underline{x} = \underline{x}'$ 时, 有

$$g^0(\underline{0}; 0^-) = \mp \int \frac{\mathrm{d}^3 p}{(2\pi)^3} n^0_{\underline{p}} \tag{3.2.22}$$

不难看出, 借助于傅里叶变换式 (3.2.7) 和式 (3.2.8), 容易求 4- 动量空间中的松原函数:

$$g^0_{\alpha\alpha'}(\underline{p};\mathrm{i}\omega_n)=\int_0^\beta \mathrm{d}(\tau-\tau')\int \mathrm{d}^3(x-x')\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n(\tau-\tau')-\mathrm{i}\underline{p}\cdot(\underline{x}-\underline{x}')}g^0_{\alpha\alpha'}(\underline{x}-\underline{x}';\tau-\tau') \tag{3.2.23}$$

将式 (3.2.20) 代入得

$$g^0_{\alpha\alpha'}(\underline{p};\mathrm{i}\omega_n)=\frac{\delta_{\alpha\alpha'}}{\mathrm{i}\omega_n-\varepsilon^0_p+\mu}=\delta_{\alpha\alpha'}g^0(\underline{p};\mathrm{i}\omega_n) \tag{3.2.24}$$

其中利用了式 (3.2.5) 和式 (3.2.6). 上式对于自由费米子和自由玻色子均适用, 这意味着所有关于统计的信息都蕴涵于松原频率中. 式 (3.2.23) 的逆傅里叶变换为

$$g^0_{\alpha\alpha'}(\underline{x}-\underline{x}';\tau-\tau')=\frac{1}{\beta}\sum_n\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_n(\tau-\tau')+\mathrm{i}\underline{p}\cdot(\underline{x}-\underline{x}')}g^0_{\alpha\alpha'}(\underline{p};\mathrm{i}\omega_n) \tag{3.2.25}$$

三、泊松求和公式

在有限温度情形的实际计算中, 常利用频率表象, 从而需要对分离的松原频率求和. 例如, 常需要计算诸如 $\sum\limits_n F(\mathrm{i}\omega_n)$ 的表达式, 其中, F 是一般函数.

一个重要的技巧是将分离的求和转变成围道积分, 然后利用残数定理计算围道积分. 要能做到这一点, 必须注意到分布函数与 β 的乘积函数 $g(z)=\dfrac{\beta}{\mathrm{e}^{\beta z}\mp 1}$ 的极点恰好处在每个分离频率 $z=\mathrm{i}\omega_n$ 上, 其中, ω_n 是按式 (3.2.5) 和式 (3.2.6) 来定义的. 故利用残数定理可知如下**泊松求和公式**:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty}F(\mathrm{i}\omega_n)=\pm\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\int_{\mathrm{C}}\mathrm{d}zg(z)F(z) \tag{3.2.26}$$

其中, $\pm$ 分别对应于玻色子和费米子; 积分围道 C 围绕整个虚轴, 但不包括 $F(z)$ 的任何其他极点. 如图 3.2.1 所示.

计算式 (3.2.26) 中的围道积分时, 只要函数 $F(z)$ 在 $|z|\to\infty$ 衰减得比 $1/|z|$ 快, 从而使得在无穷远的圆周上的积分为零, 则我们可将围道 C 变形成 C', 使之包围 $F(z)$ 的所有极点和分支截割在内但不包围所有 $z=\mathrm{i}\omega_n$ 极点. 如图 3.2.2 所示.

这样就可以在围道 C' 上使用残数定理来计算积分:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty}F(\mathrm{i}\omega_n)=\pm\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\int_{C'}\mathrm{d}zg(z)F(z) \tag{3.2.27}$$

注意: 围道 C' 是顺时针走向.

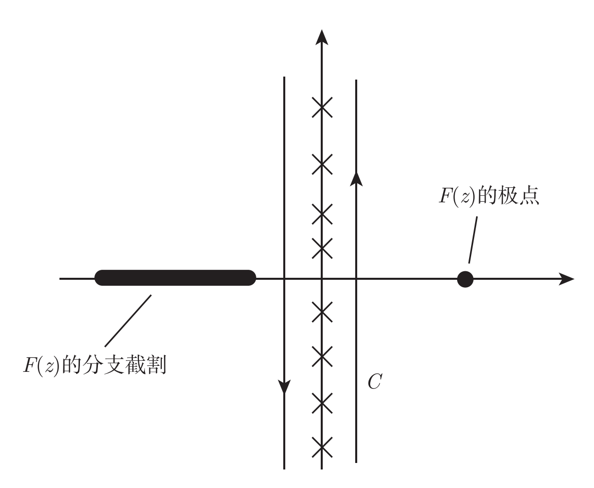


图 3.2.1　积分围道 C

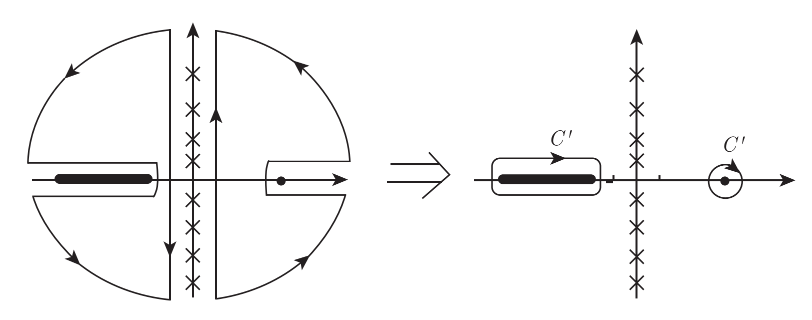


图 3.2.2　积分围道 C 变形为 C'

例　求 $\sum_n \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n 0^+}}{\mathrm{i}\omega_n - x}$.

解　$F(z) = \frac{\mathrm{e}^{z0^+}}{z-x}$, 其中, 收敛因子 e^{z0^+} 对于我们能够应用 “约当引理” 来计算围道积分是重要的. 它也使得 $F(z)$ 满足我们前面所要求的衰减得比 $1/|z|$ 快的要求. 事实上, 当 $\mathrm{Re}z > 0$, z 沿径向趋于无穷时, 被积函数的数量级为 $|z|^{-1}\exp(-\beta \mathrm{Re}z)$, 而当 $\mathrm{Re}z < 0$ 时, 被积函数 $\sim |z|^{-1}\exp(-\eta|\mathrm{Re}z|)$(其中, 正数 $\eta \to 0^+$). $F(z)$ 只有一个极点 x. 这样

$$\sum_n \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n 0^+}}{\mathrm{i}\omega_n - x} = \pm\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\int_{C'} \mathrm{d}z \frac{\beta}{\mathrm{e}^{\beta z} \mp 1}\frac{\mathrm{e}^{z0^+}}{z-x}$$

故得公式

$$\sum_n \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n 0^+}}{\mathrm{i}\omega_n - x} = \frac{\mp\beta}{\mathrm{e}^{\beta x} \mp 1} \tag{3.2.28}$$

第三节 有限温度图形微扰论

一、与零温情形的比较

有限温度情形的图形技术可以用一种和零温情形相似的方式来建立, 其原因是: ① 有限温度下的场算符 $\hat{\psi}_\lambda(\tau) = \mathrm{e}^{\hat{H}^\mu \tau}\hat{\psi}_\lambda \mathrm{e}^{-\hat{H}^\mu \tau}$ 与零温下的场算符 $\hat{\psi}_\lambda(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}^\mu t}\hat{\psi}_\lambda \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}^\mu t}$(这里考虑到巨正则系综, 已将 $\hat{H}$ 换成了 $\hat{H}^\mu$) 的区别仅在于用 τ 形式地替代 $\mathrm{i}t$. ② 零温下对 t 编时的算符乘积平均值的广义 Wick 定理可推广到有限温度时对 τ 编时的算符乘积平均值的广义 Wick 定理. 这一结果 "在宏观极限" 下显然是正确的. 这是因为在零温时的证明中 (参见式 (2.5.14)$\sim$ 式 (2.5.16)), 我们事实上并没有对 "平均" 施加任何本质上的限定, 因此那种平均即使对于体系的任意量子态也仍然成立.

这样, 有限温度下的费曼图与零温时的图形是完全相同的, 图形的费曼规则也只需作小的修改.

二、巨正则势的图形技术

在相互作用绘景中, 巨正则势满足

$$\Delta\Omega \equiv \Omega - \Omega_0 = -\beta^{-1}\ln\left\langle T\mathrm{e}^{-\int_0^\beta \mathrm{d}\tau \hat{H}_\mathrm{I}'(\tau)}\right\rangle_0$$

与零温时的从基态到基态的散射振幅 S 的对数

$$\ln S = \ln\left\langle T\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t \hat{H}_\mathrm{I}'(t)}\right\rangle_0$$

相比较, 可看出巨正则势 Ω 的图形将和 $\ln S$ 一样仅是由封闭环构成的连通图. 其次可看出, 在坐标空间中对时间的积分不再是 $-\infty \sim \infty$, 而是改为 $0\sim \beta$. n 阶项贡献不再是 $(-i)^n$ 而应改为 $(-1)^n$. 对比一下各自的定义就会发现图形中的自由传播子线的贡献不再是 $\mathrm{i}G^0_{\lambda\lambda'}(t,t')$ 而是 $-g^0_{\lambda\lambda'}(\tau-\tau')$. 最后总的结果还要多乘以 $-\beta^{-1}$.

现仍用有两两相互作用的非相对论性费米子体系作为例子, 此时相互作用势可由

$$\begin{aligned}U_{\alpha\beta,\alpha'\beta'}(\underline{x}-\underline{x}',\tau-\tau') &= V_{\alpha\beta,\alpha'\beta'}(\underline{x}-\underline{x}')\delta(\tau-\tau')\\ &= \frac{1}{\beta}\sum_n\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}[\omega_n(\tau-\tau')-\underline{p}\cdot(\underline{x}-\underline{x}')]}V_{\alpha\beta,\alpha'\beta'}(\underline{p})\end{aligned}$$

来描述.

(1) 巨正则势 $\Delta\Omega$ 的坐标空间中的费曼规则总结如下.

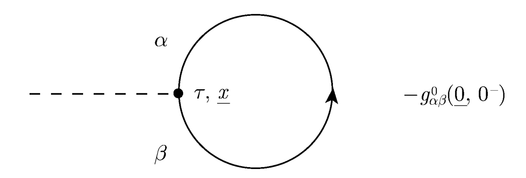
规则 Ω1　(1°) 自由传播子的费曼图及其贡献为

$\tau'\underline{x}', \beta$ ——→—— $\tau\underline{x}, \alpha$　　$-g^0_{\alpha\beta}(\underline{x}-\underline{x}', \tau-\tau')$

(2°) 对于两个时间变量相等的传播子应解释成

$$g^0_{\alpha\beta}(\underline{x}-\underline{x}';0^-) = \lim_{\tau'\to\tau^+} g^0_{\alpha\beta}(\underline{x}-\underline{x}';\tau-\tau') \tag{3.3.1}$$

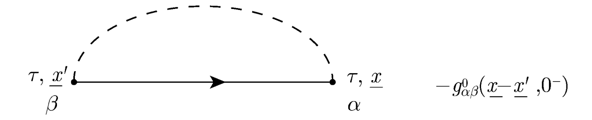
有两种时间变量相等的情形, 一种是形成一个闭合圈的传播子:



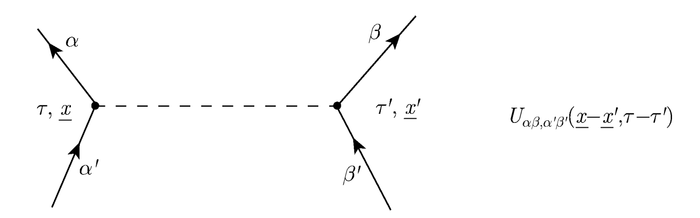
其中

$$g^0_{\alpha\beta}(\underline{0}, 0^-) \equiv g^0_{\alpha\beta}(\underline{x}-\underline{x}';\tau-\tau')|_{\tau'=\tau+0^+,\underline{x}'=\underline{x}} \tag{3.3.2}$$

另一种是两个端点与同一相互作用 U 线连接的传播子:



规则 Ω2　用虚线 (U 线) 表示相互作用顶角, 如下所示:



规则 Ω3　画出所有连通的拓扑不等价的封闭环, 逆着费米子线箭头方向写出各自由传播子贡献. n 阶图形有 n 条 U 线.

规则 Ω4　每个费米子圈贡献一个因子 (-1).

规则 Ω5　对于 n 阶图, 有一因子 $\dfrac{(-1)^n}{Q}$, 并且最后结果要乘以 $-\beta^{-1}$. 其中 Q 为图形的对称因子.

规则 Ω6　写出所有图的贡献, 对所有空间坐标积分, 对时间的积分区间是 $0\sim\beta$, 并对所有自旋指标求和.

例　对于最低阶 (Hartree-Fock 近似) 的连通的封闭环, 有如图 3.3.1 所示的两个 (对称因子 $Q=2$).

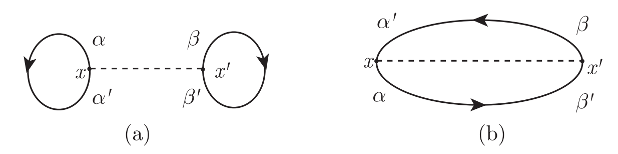


图 3.3.1　巨正则势的最低阶图

$$
\begin{aligned}
\Omega_{(\mathrm{a})} =& -\beta^{-1}\frac{(-1)^1}{2}(-1)^2\int \mathrm{d}^3x\mathrm{d}^3x'\int_0^\beta \mathrm{d}\tau\mathrm{d}\tau'(-1)g^0_{\alpha'\alpha}(\underline{0},0^-)(-1)g^0_{\beta'\beta}(\underline{0},0^-)\\
&\cdot U_{\alpha\beta,\alpha'\beta'}(\underline{x}-\underline{x}',\tau-\tau')\\
=&\frac{V}{2}\int\frac{\mathrm{d}^3p\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^6}n^0_{\underline{p}}n^0_{\underline{q}}V_{\alpha\beta,\alpha\beta}(\underline{0})\\
\Omega_{(\mathrm{b})} =& -\beta^{-1}\frac{(-1)^1}{2}(-1)\int \mathrm{d}^3x\mathrm{d}^3x'\int_0^\beta \mathrm{d}\tau\mathrm{d}\tau'(-1)g^0_{\beta'\alpha}(\underline{x}'-\underline{x},0^-)(-1)g^0_{\alpha'\beta}(\underline{x}-\underline{x}',0^-)\\
&\cdot U_{\alpha\beta,\alpha'\beta'}(\underline{x}-\underline{x}',\tau-\tau')\\
=& -\frac{V}{2}\int\frac{\mathrm{d}^3p\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^6}n^0_{\underline{p}}n^0_{\underline{q}}V_{\alpha\beta,\beta\alpha}(\underline{q}-\underline{p})\\
\Delta\Omega =&\Omega_{(\mathrm{a})}+\Omega_{(\mathrm{b})}=\frac{V}{2}\int\frac{\mathrm{d}^3p\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^6}n^0_{\underline{p}}n^0_{\underline{q}}\left[V_{\alpha\beta,\alpha\beta}(\underline{0})-V_{\alpha\beta,\beta\alpha}(\underline{q}-\underline{p})\right]
\end{aligned}
\tag{3.3.3}
$$

其中, V 代表体积.

(2) 在粒子之间是两两相互作用的情形, 使用顶角对称化表象可使图形数减少. 此时相互作用势由

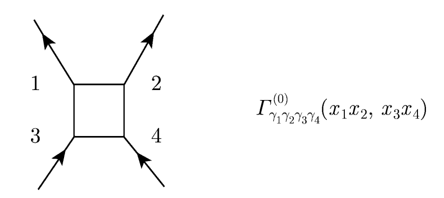
$$
\begin{aligned}
\Gamma^0_{\gamma_1\gamma_2,\gamma_3\gamma_4}(\tau_1\underline{x}_1,\tau_2\underline{x}_2;\tau_3\underline{x}_3,\tau_4\underline{x}_4) =&V_{\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4}(\underline{x}_1-\underline{x}_2)\\
&\cdot\delta(\tau_1-\tau_2)\delta(\underline{x}_1-\underline{x}_3)\delta(\tau_1-\tau_3)\delta(\underline{x}_2-\underline{x}_4)\delta(\tau_2-\tau_4)\\
&-V_{\gamma_1\gamma_2\gamma_4\gamma_3}(\underline{x}_1-\underline{x}_2)\delta(\tau_1-\tau_2)\delta(\underline{x}_1-\underline{x}_4)\delta(\tau_1-\tau_4)\\
&\cdot\delta(\underline{x}_2-\underline{x}_3)\delta(\tau_2-\tau_3)
\end{aligned}
$$

来描述, 它们有与零温时一样的对称性质.

坐标空间中巨正则势 $\Delta\Omega$ 在顶角对称化表象中的费曼规则如下.

规则 Ω1^(Hu)　与规则 Ω1 相同.

规则 Ω2^(Hu)　用空心方框代表顶角, 它提供如下一个因子:



这里为了符号简单起见, 用 1 代表 x_1、γ_1, x_1 代表 $(\tau_1,\underline{x}_1)$ 等.

每个顶角一定要与两根入射线和两根出射线相连.

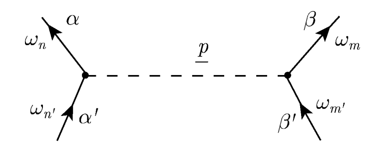
规则 $\Omega 3^{(\mathrm{Hu})}$, **规则 $\Omega 4^{(\mathrm{Hu})}$**　与规则 Ω3 和规则 Ω4 相同.

规则 $\Omega 5^{(\mathrm{Hu})}$　对于 n 阶图, 有一因子 $\dfrac{(-1)^n}{Q\cdot 2^{n_\mathrm{e}}}$, 其中, Q 为图形的对称因子, n_e 为图形中的等价对的数目. 最后结果还要乘以 $-\beta^{-1}$.

规则 $\Omega 6^{(\mathrm{Hu})}$　与规则 Ω6 相同.

(3) 对于均匀体系, 使用 4-动量空间中的费曼规则更为简便.

在 4- 动量空间中, 由于零温时的连续的能量 (或频率) 在有限温度下成为分离的频率, 有关的傅里叶变换式要发生相应的变化. 因而涉及能量 (或频率) 的费曼规则在有限温度时应作稍微改变. 事实上, 由于有 $g_{\lambda\lambda'}(\tau)=\dfrac{1}{\beta}\sum\limits_n \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_n\tau}g_{\lambda\lambda'}(\mathrm{i}\omega_n)$, 故对分离的频率求和时应带有权重因子 $\dfrac{1}{\beta}$. 另外, 在每一个顶角, 有



它的出射传播子和入射传播子将会产生一个指数因子 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\omega_n+\omega_m-\omega_{n'}-\omega_{m'})\tau}$, 它对 τ 的积分为

$$\int_0^\beta \mathrm{d}\tau \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\omega_n+\omega_m-\omega_{n'}-\omega_{m'})\tau}=\beta\delta_{\omega_n+\omega_m,\omega_{n'}+\omega_{m'}}$$

这样在每个顶角处, 不仅分离的频率 (ω_n) 守恒, 并且还会增加一个额外因子 β. 故 n 阶图会提供 β^n 的额外贡献. 此外, 当我们对每个传播子和相互作用线作傅里叶变换后, 整个图形会分离出一个对质心坐标的整体积分, 进而给出一个因子:

$$\int \mathrm{d}^3x_{\mathrm{cm}}=V$$

故有

$$\Delta\Omega=-\frac{V}{\beta}\sum[\text{动量空间中的连通真空图}] \tag{3.3.4}$$

最后我们确定总的 β 因子, 注意到 n 阶图有 $2n$ 条传播子线, 故 β 因子的幂次为 $-2n+n-1=-(n+1)$.

由此, 我们可总结出动量空间中巨正则势 $\Delta\Omega$ 的费曼规则如下.

规则 $\Omega 1_{\mathrm{P}}$　动量表象中的传播子为

$\underline{p},\ \omega_n$

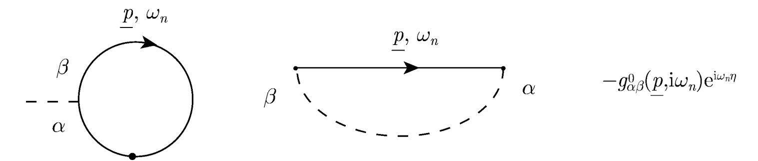
β ⟶ α　　$-g^0_{\alpha\beta}(\underline{p},\ \mathrm{i}\omega_n)$

$$g^0_{\alpha\beta}(\underline{p}, \mathrm{i}\omega_n) = \frac{\delta_{\alpha\beta}}{\mathrm{i}\omega_n - \varepsilon^0_p + \mu} = \delta_{\alpha\beta} g^0(\underline{p}, \mathrm{i}\omega_n)$$

其中

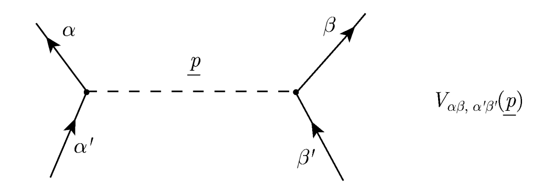
$$g^0(\underline{p}, \mathrm{i}\omega_n) = \frac{1}{\mathrm{i}\omega_n - \varepsilon^0_p + \mu} \tag{3.3.5}$$

对于形成闭合圈或两端与同一作用线连接的等时自由传播子应该理解成



其中, $\eta \to 0^+$.

规则 $\mathbf{\Omega 2_P}$　相互作用顶角为



在每个顶角, 必须都要满足频率–动量守恒定律.

规则 $\mathbf{\Omega 3_P}$　画出由封闭环构成的所有拓扑不等价的连通图, 逆着箭头方向写出各个自由传播子的贡献, 顶角贡献的写出次序无关紧要. n 阶图形中有 n 条 U 线.

规则 $\mathbf{\Omega 4_P}$　每个费米子圈贡献一个因子 (-1).

规则 $\mathbf{\Omega 5_P}$　对于 n 阶图, 有一因子 $\dfrac{(-1)^{n+1}V}{Q\beta^{n+1}}$, 其中, Q 为图形的对称因子. (注意: 其中的一个 $-V$ 来自式 (3.3.4).)

规则 $\mathbf{\Omega 6_P}$　写出所有图的贡献, 对独立的内动量 $\underline{p}$ 积分 $\left(\text{带有权重因子 } \dfrac{1}{(2\pi)^3}\right)$, 对独立的内频率 ω_n 求和并对内部自旋求和.

例　仍以 H-F 近似下的 $\Delta\Omega$ 的计算为例.

$$\begin{aligned}\Omega_\mathrm{a} =& \frac{V}{\beta^2}\frac{(-1)^2}{2}(-1)^2\sum_n\sum_m\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}\int\frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^3}\\ &\cdot(-1)g^0_{\alpha'\alpha}(\underline{p},\mathrm{i}\omega_n)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n 0^+}(-1)g^0_{\beta'\beta}(\underline{q},\mathrm{i}\omega_m)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_m 0^+}V_{\alpha\beta,\alpha'\beta'}(\underline{0})\\ \Omega_\mathrm{b} =& \frac{V}{\beta^2}\frac{(-1)^2}{2}(-1)\sum_n\sum_m\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}\int\frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^3}\\ &\cdot(-1)g^0_{\alpha'\beta}(\underline{p},\mathrm{i}\omega_n)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n 0^+}(-1)g^0_{\beta'\alpha}(\underline{q},\mathrm{i}\omega_m)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_m 0^+}V_{\alpha\beta,\alpha'\beta'}(\underline{p}-\underline{q})\end{aligned}$$

再利用频率的求和公式 (3.2.28), 即可得到 $\Delta\Omega$ 的和式 (3.3.3) 同样的结果.

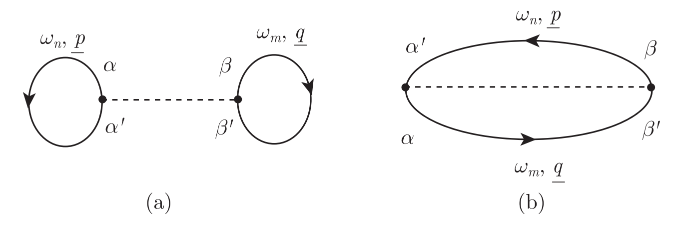


图 3.3.2　H-F 近似下的 $\Delta\Omega$ 图形

(4) 动量空间中巨正则势 $\Delta\Omega$ 在顶角对称化表象中的费曼规则.

除了利用 $\Gamma^0_{\gamma_1\gamma_2,\gamma_3\gamma_4}(\tau_1\underline{x}_1,\tau_2\underline{x}_2;\tau_3\underline{x}_3,\tau_4\underline{x}_4)$ 所对应的的傅里叶分量 $\Gamma^0_{\gamma_1\gamma_2,\gamma_3\gamma_4}$ $(\underline{p}_1,\underline{p}_2;\underline{p}_3,\underline{p}_1+\underline{p}_2-\underline{p}_3)$ 作为空心方框顶角的贡献, 以及对于 n 阶图, 有一因子 $\dfrac{(-1)^nV}{Q\beta^{n+1}2^{n_\mathrm{e}}}$(其中, Q 为图形的对称因子, n_e 为图形中的等价对的数目) 外, 其他规则与动量空间非顶角对称化表象中对应的规则一样.

例　考虑顶角对称化表象中的一阶图 (图 3.3.3).

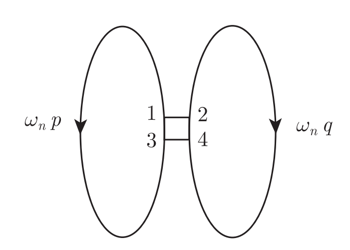


图 3.3.3　顶角对称表象中 $\Delta\Omega$ 的一阶图

该图有二个费米圈, 一个等价对, 对称因子为 1. 故

$$\begin{aligned}\Delta\Omega =&V\frac{(-1)^2}{\beta^2 2^1}(-1)^2\int\frac{\mathrm{d}^3p\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^6}\\&\cdot\sum_n\sum_m \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n 0^+}(-1)g^0_{\gamma_3\gamma_1}(\underline{p})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_m 0^+}(-1)g^0_{\gamma_4\gamma_2}(\underline{q})\Gamma^{(0)}_{\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4}(\underline{p}\,\underline{q},\underline{p}\,\underline{q})\\=&\frac{V}{2}\int\frac{\mathrm{d}^3p\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^6}n^0_{\underline{p}}n^0_{\underline{q}}\Gamma^{(0)}_{\gamma_1\gamma_2\gamma_1\gamma_2}(\underline{p}\,\underline{q},\underline{p}\,\underline{q})\end{aligned}$$

再利用式 (2.6.45), 可知

$$\Gamma^{(0)}_{\gamma_1\gamma_2\gamma_1\gamma_2}(\underline{p}\,\underline{q},\underline{p}\,\underline{q})=V_{\gamma_1\gamma_2\gamma_1\gamma_2}(\underline{0})-V_{\gamma_1\gamma_2\gamma_2\gamma_1}(\underline{p}-\underline{q})$$

由此也得到和式 (3.3.3) 同样的结果.

三、温度格林函数的图形技术

巨正则势的图形规则基本上也适用于松原函数的图形规则, 所不同的仅在于:

① 松原函数总有两个外端点和与之相连的两根外传播子; ② 与巨正则势的对称因子不同, 由于外传播子的存在, 松原函数的对称因子是 1, 并且在坐标空间中, 松原函数中没有巨正则势中的因子 $-\beta^{-1}$, 而仅是 -1.

例 坐标空间中的 H-F 近似下的松原函数.

解 (1) 非顶角对称化表象 (图 3.3.4).

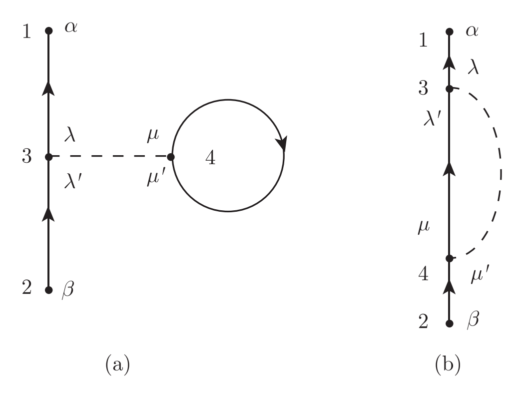


图 3.3.4 H-F 近似下的松原函数图

$$
\begin{aligned}
g_{\alpha\beta}(\underline{x}_1-\underline{x}_2,\tau_1-\tau_2)=&\int \mathrm{d}\tau_3\mathrm{d}^3x_3\mathrm{d}\tau_4\mathrm{d}^3x_4V_{\lambda\mu,\lambda'\mu'}(\underline{x}_3-\underline{x}_4)\\
&\cdot\Big[g^0_{\alpha\lambda}(\underline{x}_1-\underline{x}_3,\tau_1-\tau_3)g^0_{\lambda'\beta}(\underline{x}_3-\underline{x}_2,\tau_3-\tau_2)g^0_{\mu'\mu}(\underline{0},0^-)\\
&-g^0_{\alpha\lambda}(\underline{x}_1-\underline{x}_3,\tau_1-\tau_3)g^0_{\lambda'\mu}(\underline{x}_3-\underline{x}_4,0^-)g^0_{\mu'\beta}(\underline{x}_4-\underline{x}_2,\tau_4-\tau_2)\Big]\\
=&\int \mathrm{d}\tau_3\mathrm{d}^3x_3\mathrm{d}\tau_4\mathrm{d}^3x_4\Big[g^0(\underline{x}_1-\underline{x}_3,\tau_1-\tau_3)\\
&\cdot g^0(\underline{x}_3-\underline{x}_2,\tau_3-\tau_2)g^0(\underline{0},0^-)V_{\alpha\mu,\beta\mu}(\underline{x}_3-\underline{x}_4)\\
&-g^0(\underline{x}_1-\underline{x}_3,\tau_1-\tau_3)g^0(\underline{x}_3-\underline{x}_4,0^-)g^0(\underline{x}_4-\underline{x}_2,\tau_4-\tau_2)\\
&\cdot V_{\alpha\mu,\mu\beta}(\underline{x}_3-\underline{x}_4)\Big]
\end{aligned}\tag{3.3.6}
$$

其中, 正负因子是这样确定的: 由于自由传播子总有奇数条, 每条贡献一个因子 -1, 它和松原函数应有的整体因子 -1 相乘为 1, 故松原函数费曼图的正负号应该为 $(-1)^{n+F}$, 其中, n 是图形的阶数, F 是费米圈的数目.

(2) 顶角对称化表象 (图 3.3.5).

注意到该图只有一个费米圈, 无等价对, 故

$$
\begin{aligned}
g_{\alpha\beta}(\underline{x}-\underline{x}',\tau-\tau')=&(-1)^{1+1}\int \mathrm{d}^4x_1\mathrm{d}^4x_2\mathrm{d}^4x_3\mathrm{d}^4x_4\\
&\cdot g^0_{\alpha\gamma_1}(x-x_1)g^0_{\gamma_3\beta}(x_3-x')
\end{aligned}
$$

$$\cdot\, g^0_{\gamma_4\gamma_2}(x_4-x_2)\Gamma^{(0)}_{\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4}(x_1x_2,x_3x_4) \tag{3.3.7}$$

其中, 我们仍采用了第二章中的简略记号, 如 x_1 代表 $\tau_1,\underline{x}_1$ 等. 可以进一步证明式 (3.3.7) 可给出与式 (3.3.6) 同样的结果.

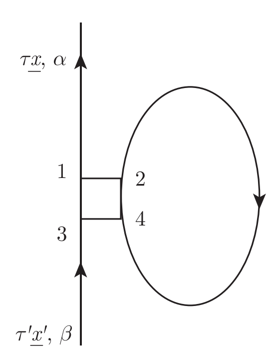


图 3.3.5　顶角对称化表象下的一阶松原函数图

借助于傅里叶变换可总结出动量空间中的费曼规则.

松原函数 g 在动量空间中的费曼规则如下.

规则 $\mathbf{g1_P}$　与规则 $\Omega 1_{\rm P}$ 相同.

规则 $\mathbf{g2_P}$　与规则 $\Omega 2_{\rm P}$ 相同.

规则 $\mathbf{g3_P}$　画出所有有一条出射传播子线和一条入射传播子线的连通的拓扑不等价图, 逆着费米子线箭头方向写出各条传播子贡献. n 阶图有 n 条 U 线.

规则 $\mathbf{g4_P}$　与规则 $\Omega 4_{\rm P}$ 相同.

规则 $\mathbf{g5_P}$　对于 n 阶图, 有一因子 $\dfrac{(-1)^n}{\beta^n}$, 最后结果还要乘以 (-1).

规则 $\mathbf{g6_P}$　与规则 $\Omega 6_{\rm P}$ 相同.

动量空间中松原函数 g 在顶角对称化表象中的费曼规则如下.

除了用 $\Gamma^0_{\gamma_1\gamma_2,\gamma_3\gamma_4}(\underline{p}_1,\underline{p}_2;\underline{p}_3,\underline{p}_1+\underline{p}_2-\underline{p}_3)$ 作为空心方框顶角的贡献, 以及对于 n 阶图, 有一因子 $\dfrac{(-1)^{n+1}}{\beta^n 2^{n_{\rm e}}}$($n_{\rm e}$ 为图形中的等价对的数目) 外, 其他规则与动量空间中非顶角对称化表象中对应的规则一样.

例　动量空间中的 H-F 近似下的松原函数.

解　(1) 非顶角对称化表象 (图 3.3.6).

$$\begin{aligned}
g^{(a)}_{\alpha\beta}(\underline{p},\mathrm{i}\omega_n) =& \frac{1}{\beta}\sum_m\int\frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^3}g^0_{\mu'\mu}(\underline{q},\mathrm{i}\omega_m)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_m0^+}\\
&\cdot g^0_{\alpha\lambda}(\underline{p},\mathrm{i}\omega_n)g^0_{\lambda'\beta}(\underline{p},\mathrm{i}\omega_n)V_{\lambda\mu,\lambda'\mu'}(\underline{0})\\
g^{(b)}_{\alpha\beta}(\underline{p},\mathrm{i}\omega_n) =& \frac{-1}{\beta}\sum_m\int\frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^3}g^0_{\lambda'\mu}(\underline{q},\mathrm{i}\omega_m)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_m0^+}
\end{aligned}$$

$$\cdot g^0_{\alpha\lambda}(\underline{p}, \mathrm{i}\omega_n) g^0_{\mu'\beta}(\underline{p}, \mathrm{i}\omega_n) V_{\lambda\mu,\lambda'\mu'}(\underline{p} - \underline{q})$$

故

$$g_{\alpha\beta}(\underline{p}, \mathrm{i}\omega_n) = \frac{1}{\beta}[g^0(\underline{p}, \mathrm{i}\omega_n)]^2 \cdot \sum_m \int \frac{\mathrm{d}^3 q}{(2\pi)^3} g^0(\underline{q}, \mathrm{i}\omega_m) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_m 0^+} \cdot [V_{\alpha\mu,\beta\mu}(\underline{0}) - V_{\alpha\mu,\mu\beta}(\underline{p} - \underline{q})] \tag{3.3.8}$$

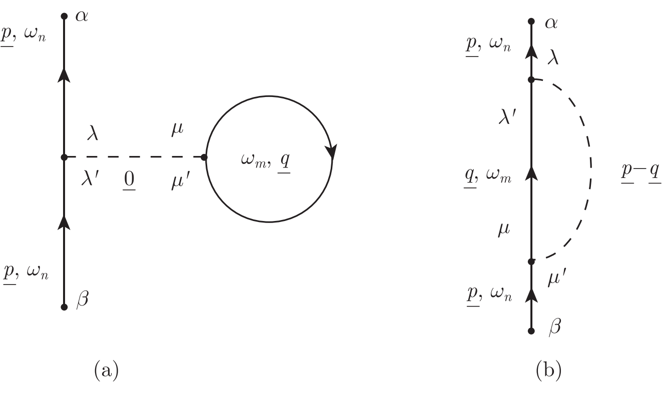


图 3.3.6 H-F 近似下的松原函数 (非顶角对称化表象)

(2) 顶角对称化表象如图 3.3.7 所示, 有

$$g_{\alpha\beta}(\underline{p}, \mathrm{i}\omega_n) = \frac{1}{\beta}[g^0(\underline{p}, \mathrm{i}\omega_n)]^2 \sum_m \int \frac{\mathrm{d}^3 q}{(2\pi)^3} g^0(\underline{q}, \mathrm{i}\omega_m) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_m 0^+} \varGamma^{(0)}_{\alpha\gamma_2\beta\gamma_2}(\underline{p}\,\underline{q}, \underline{p}\,\underline{q})$$

它显然与式 (3.3.8) 有同样结果.

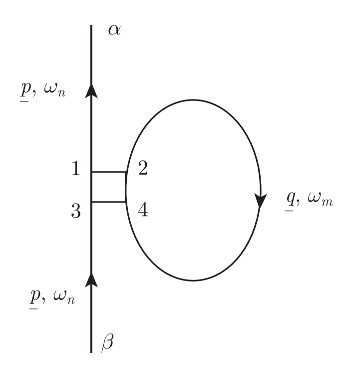


图 3.3.7 H-F 近似下的松原函数 (顶角对称化表象)

四、Dyson 方程

由于松原函数与零温格林函数有相同的费曼图, 所以它们的 Dyson 方程也有相同的形式. 采用广义爱因斯坦求和规约和自旋坐标的广义矩阵记号, Dyson 方程

仍可以写成

$$g = g^0 + g^0 \Sigma g \tag{3.3.9}$$

其中 Σ 是所有正规自能部分的和. 在坐标空间中, 式 (3.3.9) 式实际上是一个积分方程:

$$g_{\alpha\beta}(x,x') = g^0_{\alpha\beta}(x,x') + \int \mathrm{d}^4x_1 \mathrm{d}^4x_2 g^0_{\alpha\lambda}(x,x_1)\Sigma_{\lambda\mu}(x_1,x_2)g_{\mu\beta}(x_2,x') \tag{3.3.10}$$

其中, x 代表 $(\tau, \underline{x})$; d^4x 代表 $\mathrm{d}\tau\mathrm{d}^3x$, 并且 τ 的积分区间是 $(0,\beta)$.

对于具有时空平移不变性的体系, 式 (3.3.9) 可看成动量空间的代数方程

$$g_{\alpha\beta}(\underline{p},\mathrm{i}\omega_n) = g^0_{\alpha\beta}(\underline{p},\mathrm{i}\omega_n) + g^0_{\alpha\lambda}(\underline{p},\mathrm{i}\omega_n)\Sigma_{\lambda\mu}(\underline{p},\mathrm{i}\omega_n)g_{\mu\beta}(\underline{p},\mathrm{i}\omega_n) \tag{3.3.11}$$

的矩阵形式.

当相互作用与自旋无关时, 自能也是对角的:

$$\Sigma_{\lambda\mu}(\underline{p},\mathrm{i}\omega_n) = \Sigma(\underline{p},\mathrm{i}\omega_n)\delta_{\lambda\mu} \tag{3.3.12}$$

代入式 (3.3.11) 得

$$g_{\alpha\beta}(\underline{p},\mathrm{i}\omega_n) = \frac{\delta_{\alpha\beta}}{[g^0(\underline{p},\mathrm{i}\omega_n)]^{-1} - \Sigma(\underline{p},\mathrm{i}\omega_n)} \tag{3.3.13}$$

和零温情形一样, 也可引入有效势 V_{eff} 和极化部分 $\tilde{\Pi}$(其中, 不可约极化部分记为 Π). 对于均匀体系, 有

$$V_{\mathrm{eff}}(q)_{\alpha\beta,\alpha'\beta'} = V(q)_{\alpha\beta,\alpha'\beta'} + V(q)_{\alpha\mu,\alpha'\mu'}\Pi(q)_{\mu\nu,\mu'\nu'}V_{\mathrm{eff}}(q)_{\nu\beta,\nu'\beta'} \tag{3.3.14}$$

其中, q 代表 $(\mathrm{i}\omega_n, \underline{q})$. 在与自旋无关情形, 由上式得

$$V_{\mathrm{eff}}(q) = \frac{V(q)}{1 - V(q)\Pi(q)} \tag{3.3.15}$$

第四节　松原函数与热力学量

一、巨正则势与松原函数的关系

为简洁起见, 本节仅考虑动量空间中顶角对称化表象.

运用松原函数 g 可以减少巨正则势 Ω 的图形数目. 例如, 将图 3.4.1(a) 中的自由传播子细线换成完全格林函数粗线所得的图形就代表了等式右端的许多图. 然而这些图形中, 仅 (a) 的内部不再含有相当于对传播子修正的子图 (即无自能插入的图形), 我们把这种图形叫**骨架图形**. 图 3.4.1 中的其他图形都可视为由此骨架图形通过自能插入而得到的图形. 图 3.4.2 给出了其他骨架图形中的一个例子.

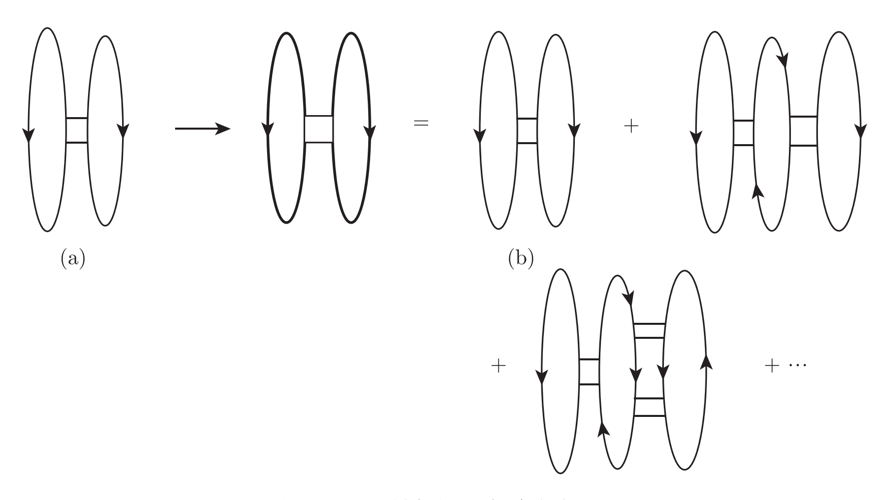


图 3.4.1 骨架图形与自能插入

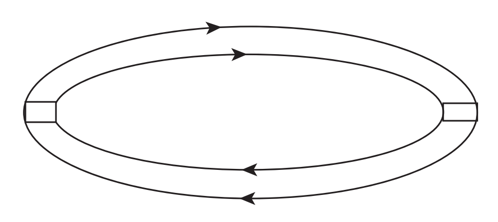


图 3.4.2 骨架图形的例子

初看上去, 似乎可通过画出所有骨架图, 然后将其中的自由传播子换成完全格林函数就能得出巨正则势, 然而有两个困难阻碍这种方法的实施. ① 按这种方法并不总是能得到一个图形应该贡献的正确的数值因子; ② 需要克服重复计数的困难. 图 3.4.3 给出了重复计数的一个例子.

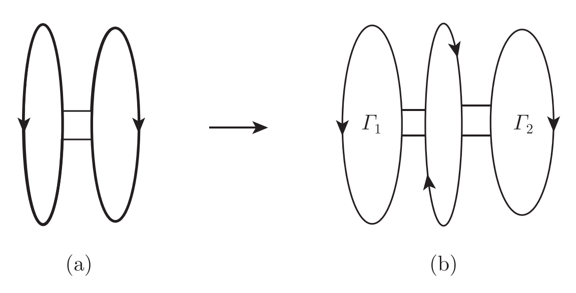


图 3.4.3 重复计数的例图

由图 3.4.3(a) 给出图 3.4.3(b), 可有两种不同方式: 一种是将 Γ_1 作为顶角, Γ_1 的右边作为完全格林函数, 另一种是将 Γ_2 作为顶角, 而将 Γ_2 的左边作为完全格林函数.

下面讨论一种有趣的新方法, 它可以避免上述困难.

考虑 Ω 的任意一个 n 阶图, 它含有 $2n$ 条传播子线, 如果截断其中任意一条传播子线, 就能得到 g 的一个 n 阶图. 通过这种截断, 可得到 g 的每个 n 阶图至少一次. 对于对称因子 $Q=1$ 及等价对的数目 $n_{\rm e}=1$ 的 Ω 图, 用这种方式可得到唯一一个 g 图.

当 $Q\neq 1$ 时, 通过对 Ω 图的截断可 Q 次得到相同的图, 这可消去 Ω 图形规则中的 $1/Q$ 因子. 图 3.4.4 给出了这样的一个例子, 图形中的双斜线代表了截断的位置. 图 3.4.4(a) 所代表的 Ω 图的对称因子 $Q=2$, 它的一种截断导致图 3.4.4(b) 所代表的 g 图, 而另一种截断导致图 3.4.4(c), 它等同于图 3.4.4(d). 又由于 $\tau_{\rm a},\tau_{\rm b}$ 只是两个哑标 (积分变量), 故图 3.4.4(d) 和 (b) 视为相同, 即我们两次得到相同的图.

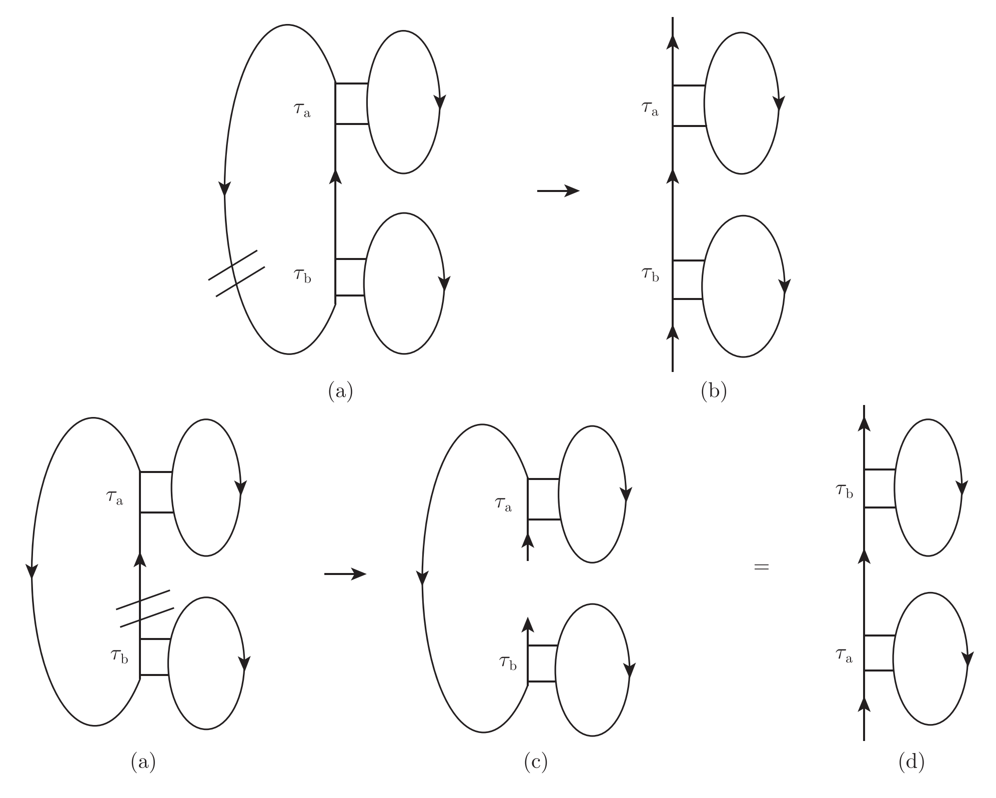


图 3.4.4　对 Ω 图截断得到 g 图

当 $n_{\rm e}\neq 0$ 时, 可通过对 Ω 图中的每个等价对中的两条传播子线轮流作截断而两次得到相同的图. 图 3.4.5 给出了这样的一个例子.

图 3.4.5 中 Ω 的 $n_{\rm e}=1$, 截断 (a) 左边传播子线得到 (b), 而截断 (a) 右边传播

子线得到 (c), 从而两次得到相同的图.

若轮番将 Ω 的所有 n 阶图的每条传播子线加以截断, 就能以正确的权重得到 g 的每个 n 阶图刚好一次. 另外, 取 g 的每个 n 阶图, 并将它的入射线和出射线连接起来, 就可以 $2n$ 次得到 Ω 的每个 n 阶图, 这是因为 Ω 的 n 阶图中有 $2n$ 条传播子用来加以截断.

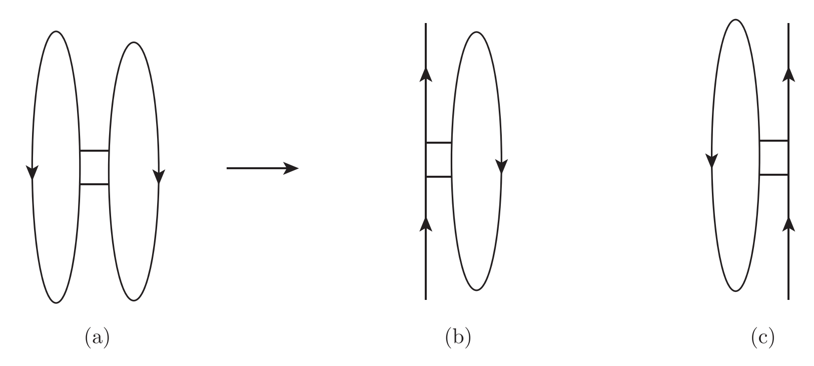


图 3.4.5　对等价对中的传播子线截断

故对于 Ω 的 n 阶项 Ω_n, 如下关系式成立:

$$\Omega_n = \frac{1}{2n}\frac{(-V)}{\beta}(-1)\sum_m \int \frac{\mathrm{d}^3 p}{(2\pi)^3} g^{(0)-1}_{\alpha\beta}(\underline{p}, \mathrm{i}\omega_m) g^{(n)}_{\beta\alpha}(\underline{p}, \mathrm{i}\omega_m) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_m 0^+} \tag{3.4.1}$$

其中, $g^{(n)}$ 是 g 的 n 阶项; $g^{(0)}$ 是自由传播子; $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_m 0^+}$ 因子是使得求和为有限值的收敛因子; $g^{(0)-1}$ 是由于截断一条 Ω 中的标记为 $(\omega_m, \underline{p})$ 的传播子会得到两条 $g^{(0)}(\mathrm{i}\omega_m, \underline{p})$ 的传播子; -1 因子来自于当我们截断一条 Ω 中的传播子线时, 会减少一个闭合费米圈的数目; 因子 $\dfrac{(-V)}{\beta}$ 来自于前面关于 Ω 图的规则.

式 (3.4.1) 中 Ω_n 含有因子 $1/n$, 在对微扰级数求和时非常不方便. 为了去掉它, 我们引入 $\Omega(\lambda)$, 它对应于相互作用为 $\lambda \hat{H}'_{\mathrm{I}}(\tau)$ 的情形, 故 $\Omega_n(\lambda)$ 中含有 λ^n. 利用 $\lambda\dfrac{\partial \lambda^n}{\partial \lambda} = n\lambda^n$, 可得

$$\lambda\frac{\partial \Omega_n}{\partial \lambda} = \frac{V}{2\beta}\sum_m \int \frac{\mathrm{d}^3 p}{(2\pi)^3} g^{(0)-1}_{\alpha\beta}(\underline{p}, \mathrm{i}\omega_m) g^{\lambda(n)}_{\beta\alpha}(\underline{p}, \mathrm{i}\omega_m) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_m 0^+} \tag{3.4.2}$$

其中, $g^{\lambda(n)}_{\beta\alpha}$ 是 $\lambda \hat{H}'_{\mathrm{I}}(\tau)$ 下的完全格林函数 $g^{\lambda}_{\alpha\beta}$ 的 n 阶项, 故有

$$\lambda\frac{\partial \Omega}{\partial \lambda} = \frac{V}{2\beta}\sum_m \int \frac{\mathrm{d}^3 p}{(2\pi)^3} g^{(0)-1}_{\alpha\beta}(\underline{p}, \mathrm{i}\omega_m) \left[g^{\lambda}_{\beta\alpha}(\underline{p}, \mathrm{i}\omega_m) - g^{0}_{\beta\alpha}(\underline{p}, \mathrm{i}\omega_m)\right] \cdot \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_m 0^+} \tag{3.4.3}$$

其中, 用了 $g^{\lambda}_{\beta\alpha}(\underline{p}, \mathrm{i}\omega_m) - g^{0}_{\beta\alpha}(\underline{p}, \mathrm{i}\omega_m)$ 而不是 $g^{\lambda}_{\beta\alpha}(\underline{p}, \mathrm{i}\omega_m)$ 是因为 g^{λ} 的零阶项不能

从 Ω 的图形进行截断来得到. 再利用泊松方程就得到

$$\lambda\frac{\partial\Omega}{\partial\lambda}=\frac{V}{2\beta}\sum_m\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}\Sigma_{\alpha\beta}(\underline{p},\mathrm{i}\omega_m)g^{\lambda}_{\beta\alpha}(\underline{p},\mathrm{i}\omega_m)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_m0^+}\tag{3.4.4}$$

对上式 λ 积分并注意条件 $\Omega(\lambda=0)=\Omega_0$, 则得

$$\Omega=\Omega_0+\frac{V}{2}\int_0^1\frac{\mathrm{d}\lambda}{\lambda}\frac{1}{\beta}\sum_m\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}\Sigma^{\lambda}_{\alpha\beta}(\underline{p},\mathrm{i}\omega_m)g^{\lambda}_{\beta\alpha}(\underline{p},\mathrm{i}\omega_m)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_m0^+}\tag{3.4.5}$$

初看上去式 (3.4.5) 似乎是格林函数和体系巨正则势之间的直接联系, 因为只要知道了格林函数, 从而也就知道了自能, 进而可由式 (3.4.5) 得到巨正则势并由此求得各种热力学量, 在某些情形的确如此. 然而在某些情形, 式 (3.4.5) 仍存在如下困难: 式 (3.4.5) 涉及对相互作用强度 (λ) 的积分, 由于在实际计算中人们常对格林函数作某些近似, 而这些近似通常只对相互作用强度的某些区域才是合理的, 有可能这些近似并不适合相互作用强度的整个积分区域, 从而造成很大的不便.

我们也可以计算 Ω 对各种参数值得微商, 从而把 Ω 通过 g 表示出来. 首先利用 Ω 的定义式 (3.1.3), 易知

$$\left(\frac{\partial\Omega}{\partial m}\right)_{T,v,\mu}=\left\langle\frac{\partial\hat{H}}{\partial m}\right\rangle$$

其中, m 是粒子质量; $\hat{H}$ 是体系的哈密顿. 由于有

$$\frac{\partial\hat{H}}{\partial m}=\frac{1}{2m^2}\int\mathrm{d}^3r\hat{\psi}^{+}_{\alpha}(\underline{x})\boldsymbol{\nabla}^2\hat{\psi}_{\alpha}(\underline{x})$$

故

$$\frac{\partial\Omega}{\partial m}=\pm\frac{1}{2m^2}\int\mathrm{d}^3r\boldsymbol{\nabla}^2_{\underline{x}}g_{\alpha\alpha}(\underline{x}-\underline{x}',0^-)|_{\underline{x}'=\underline{x}}$$

用傅里叶分量表达为

$$\frac{\partial\Omega}{\partial m}=\mp\frac{V}{m\beta}\sum_n\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}\frac{\underline{p}^2}{2m}g_{\alpha\alpha}(\underline{p},\mathrm{i}\omega_n)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n0^+}\tag{3.4.6}$$

通过对 m 的积分及 $\Omega(m)$ 的某一个已知值, 就可以求出 Ω. 由

$$\hat{N}=\left\langle\int\mathrm{d}^3r\hat{\psi}^{+}_{\alpha}(\underline{x})\hat{\psi}_{\alpha}(\underline{x})\right\rangle=\mp\int\mathrm{d}^3rg_{\alpha\alpha}(\underline{x}-\underline{x}',0^-)|_{\underline{x}'=\underline{x}}$$

用傅里叶分量表达为

$$\frac{\partial\Omega}{\partial\mu}=-N=\pm\frac{V}{\beta}\sum_n\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}g_{\alpha\alpha}(\underline{p},\mathrm{i}\omega_n)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n0^+}\tag{3.4.7}$$

通过对 μ 的积分, 原则上也可用来确定出 Ω. 但是用式 (3.4.6) 和式 (3.4.7) 来确定 Ω 并没有很多的实际应用. 我们将在以后介绍一个更有用的关系式, 它直接给出了能量期待值和完全格林函数之间的关系, 从而容易借助于能量来计算许多热力学量.

二、Luttinger-Ward 泛函

取出 Ω 的所有骨架图形, 并将其中的所有细线 (自由传播子) 换成粗线 (完全格林函数), 其他图形规则仍与本章第三节中的相应规则相同, 这样所得图形的和记为 Φ, 称为 **Luttinger-Ward(L-W) 泛函**.

考虑 Φ 中有明显 l 个顶角的图形 (蕴含在粗线中的顶角不算), 则按照导出式 (3.4.1) 同样的道理, 知

$$\Phi_l = \mp\frac{1}{2l}\frac{V}{\beta}\sum_m \int \frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3} g^{(0)-1}_{\alpha\beta}(\underline{p}, \mathrm{i}\omega_m) g^{(l)}_{\beta\alpha}(\underline{p}, \mathrm{i}\omega_m) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_m 0^+} \tag{3.4.8}$$

其中, $g^{(l)}$ 是 g 的 l 阶贡献, 并且仅计及明显出现在骨架图形中的顶角. 这样

$$\Phi = \mp\frac{V}{2\beta}\sum_l\sum_m \int \frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3} \frac{1}{l} g^{(0)-1}_{\alpha\beta}(\underline{p}, \mathrm{i}\omega_m) g^{(l)}_{\beta\alpha}(\underline{p}, \mathrm{i}\omega_m) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_m 0^+} \tag{3.4.9}$$

注意到 $g = g^0 + g^0\Sigma g$, 将 Φ 对 g 求导, 这相当于将 l 阶图中的 $2l$ 条 g 线轮流移除, 从而除了一个数值因子外只剩下唯一的自能图 Σ, 并且由于原来的 Φ 图是骨架图, 这个剩下的自能图一定是正规自能图. 这样有

$$\frac{\delta\Phi}{\delta g_{\alpha\beta}(\underline{p}, \mathrm{i}\omega_m)} = \mp\frac{V}{\beta(2\pi)^3}\Sigma_{\alpha\beta}(\underline{p}, \mathrm{i}\omega_m) \tag{3.4.10}$$

自能函数可以作为 L-W 泛函的泛函导数而得到, 这是 L-W 泛函的一个重要特点.

下面定义 $\bar{\Omega}$ 为

$$\begin{aligned}\bar{\Omega} =& \Omega_0 \mp \frac{V}{\beta}\sum_n \int \frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n 0^+}\left\{ \ln\left[g_{\alpha\beta}(\underline{p}, \mathrm{i}\omega_n) g^{(0)-1}_{\beta\alpha}(\underline{p}, \mathrm{i}\omega_n)\right]\right.\\ &\left. - g^{(0)-1}_{\alpha\beta}(\underline{p}, \mathrm{i}\omega_n) g_{\beta\alpha}(\underline{p}, \mathrm{i}\omega_n) + 1\right\} + \Phi\end{aligned} \tag{3.4.11}$$

可以证明

$$\bar{\Omega} = \Omega \tag{3.4.12}$$

证明 将式 (3.4.11) 对 g 求导, 并利用 $g = g^0 + g^0\Sigma g$, 得

$$\frac{\delta\bar{\Omega}}{\delta g(\underline{p}, \mathrm{i}\omega_n)} = 0 \tag{3.4.13}$$

让 $\bar{\Omega}(\lambda)$ 和 $\Omega(\lambda)$ 一样仅通过相互作用而明显地依赖于 λ, 由于上式所显示出的 $\bar{\Omega}$ 作为 g(或作为 Σ) 的泛函的稳恒性, 我们可以忽略 g 和 Σ 对 λ 的依赖. 故从式 (3.4.9) 得

$$\begin{aligned}\lambda\frac{\partial\bar{\Omega}}{\partial\lambda}&=\mp\frac{V}{2\beta}\sum_{l}\sum_{m}\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}g_{\alpha\beta}^{(0)-1}(\underline{p},\mathrm{i}\omega_m)g_{\beta\alpha}^{\lambda(l)}(\underline{p},\mathrm{i}\omega_m)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_m0^+}\\&=\mp\frac{V}{2\beta}\sum_{m}\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}g_{\alpha\beta}^{(0)-1}(\underline{p},\mathrm{i}\omega_m)\left[g_{\beta\alpha}^{\lambda}(\underline{p},\mathrm{i}\omega_m)-g_{\beta\alpha}^{(0)-1}(\underline{p},\mathrm{i}\omega_m)\right]\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_m0^+}\\&=\lambda\frac{\partial\Omega}{\partial\lambda}\end{aligned}\tag{3.4.14}$$

另外, 由式 (3.4.11) 知

$$\bar{\Omega}(\lambda=0)=\Omega_0\tag{3.4.15}$$

故由式 (3.4.14) 和式 (3.4.15) 知

$$\bar{\Omega}=\Omega$$

式 (3.4.11) 和式 (3.4.12) 还可以改写成如下形式:

$$\Omega=\mp\frac{V}{\beta}\sum_{n}\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n0^+}\left\{\ln g_{\alpha\alpha}(\underline{p},\mathrm{i}\omega_n)-\Sigma_{\alpha\beta}(\underline{p},\mathrm{i}\omega_n)g_{\beta\alpha}(\underline{p},\mathrm{i}\omega_n)\right\}+\Phi\tag{3.4.16}$$

证明 令

$$\begin{aligned}\gamma_0&=\mp\frac{V}{\beta}\sum_{n}\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n0^+}\ln g_{\alpha\alpha}^{0}(\underline{p},\mathrm{i}\omega_n)\\&=\frac{V}{2\pi\mathrm{i}}\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}\int_C\mathrm{d}\omega\ln(\omega-\varepsilon_{\underline{p}}+\mu)\frac{\mathrm{e}^{\omega0^+}}{\mathrm{e}^{\beta\omega}\mp1}\end{aligned}$$

其中, 积分围道围绕整个虚轴, 但不包括 $\ln(\omega-\varepsilon_{\underline{p}}+\mu)$ 的极点. 由于 $\mathrm{e}^{\omega0^+}/(\mathrm{e}^{\beta\omega}\mp1)$ 的存在, 被积函数在整个无穷大圆周上的积分为零, 故式 (3.2.25) 成立, 即可将积分围道变形为 C', 它是顺时针方向, 并利用分部积分得

$$\begin{aligned}\gamma_0&=\mp\frac{V}{\beta(2\pi\mathrm{i})}\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}\int_{C'}\mathrm{d}\omega\frac{\mathrm{e}^{\omega0^+}}{\omega-\varepsilon_{\underline{p}}+\mu}\ln(1\mp\mathrm{e}^{-\beta\omega})\\&=\pm\frac{V}{\beta}\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}\ln\left[1\mp\mathrm{e}^{-\beta(\varepsilon_{\underline{p}}-\mu)}\right]\equiv\Omega_0\end{aligned}$$

代入式 (3.4.11) 并利用泊松方程, 即可得知式 (3.4.16) 成立.

式 (3.4.11)~ 式 (3.4.13) 给出了**变分原理**: 巨正则势对于 g(或 Σ) 的变化是稳定的.

式 (3.4.11) 或式 (3.4.16) 的优点在于它没有涉及对相互作用强度的积分, 但付出的代价是要对一类骨架图形的进一步求和.

第五节 解析延拓及实时温度格林函数

尽管利用松原函数可以直接计算热力学量, 但仍然有许多体系的性质不能直接由松原函数给出. 例如, 输运和响应等方面, 它们直接与实时格林函数 (或关联函数) 相联系. 所以我们来研究如何从松原函数导出实时格林函数, 这常可借助于解析延拓的方法.

现在首先来研究松原函数的解析性质. 设 $\hat{H}^\mu = \hat{H} - \mu\hat{N}$ 的本征矢量为 $|\nu, N\rangle$: $H^\mu|\nu, N\rangle = (E_{N\nu} - \mu N)|\nu, N\rangle$, 它也是粒子数算符的本征矢量, 其本征值为 N. 利用 $\{|\nu, N\rangle\}$ 的完备性关系可得

$$\begin{aligned}
g_{\lambda\lambda'}(\tau) &= -\langle T\hat{\psi}_\lambda(\tau)\hat{\psi}^+_{\lambda'}(0)\rangle = -\mathrm{tr}\left[\hat{\rho}T\hat{\psi}_\lambda(\tau)\hat{\psi}^+_{\lambda'}(0)\right] \\
&= \frac{-1}{Z}\sum_{\nu N}\langle\nu N|\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}^\mu}\mathrm{e}^{\hat{H}^\mu\tau}\hat{\psi}_\lambda\mathrm{e}^{-\hat{H}^\mu\tau}\hat{\psi}^+_{\lambda'}|\nu N\rangle \\
&= \frac{-1}{Z}\sum_{\nu N\nu' N'}\langle\nu N|\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}^\mu}\mathrm{e}^{\hat{H}^\mu\tau}\hat{\psi}_\lambda\mathrm{e}^{-\hat{H}^\mu\tau}|\nu' N'\rangle\langle\nu' N'|\hat{\psi}^+_{\lambda'}|\nu N\rangle
\end{aligned}$$

再利用 $\hat{\psi}_\lambda$ 消灭一个粒子和 $\hat{\psi}^+_{\lambda'}$ 产生一个粒子的性质可知, $N' = N + 1$. 故

$$\begin{aligned}
g_{\lambda\lambda'}(\tau) =& \frac{-1}{Z}\sum_{\nu N\nu'}\mathrm{e}^{-\beta(E_{N\nu}-\mu N)}\mathrm{e}^{\tau(E_{N\nu}-E_{N+1,\nu'}+\mu)} \\
&\cdot\langle\nu N|\hat{\psi}_\lambda|\nu', N+1\rangle\langle\nu', N+1|\hat{\psi}^+_{\lambda'}|\nu N\rangle
\end{aligned}$$

它的傅里叶变换为

$$\begin{aligned}
g_{\lambda\lambda'}(\mathrm{i}\omega_n) =& \int_0^\beta \mathrm{d}\tau\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n\tau}g_{\lambda\lambda'}(\tau) = \frac{1}{Z}\sum_{\nu N\nu'}\mathrm{e}^{-\beta(E_{N\nu}-\mu N)} \\
&\cdot\frac{\langle\nu N|\hat{\psi}_\lambda|\nu', N+1\rangle\langle\nu', N+1|\hat{\psi}^+_{\lambda'}|\nu N\rangle}{\mathrm{i}\omega_n - E_{N+1,\nu'} + E_{N\nu} + \mu}\left[1 \mp \mathrm{e}^{(E_{N\nu}-E_{N+1,\nu'}+\mu)\beta}\right]
\end{aligned}$$

再利用哑指标的任意替换性, 可得

$$\begin{aligned}
g_{\lambda\lambda'}(\mathrm{i}\omega_n) =& \frac{1}{Z}\sum_{\nu N\nu'}\mathrm{e}^{-\beta(E_{N\nu}-\mu N)}\left(\frac{\langle\nu N|\hat{\psi}_\lambda|\nu', N+1\rangle\langle\nu', N+1|\hat{\psi}^+_{\lambda'}|\nu N\rangle}{\mathrm{i}\omega_n - E_{N+1,\nu'} + E_{N\nu} + \mu}\right. \\
&\left.\mp\frac{\langle\nu N|\hat{\psi}^+_{\lambda'}|\nu', N-1\rangle\langle\nu', N-1|\hat{\psi}_\lambda|\nu N\rangle}{\mathrm{i}\omega_n - E_{N,\nu} + E_{N-1,\nu} + \mu}\right) \qquad (3.5.1)
\end{aligned}$$

现在考虑动量表象以及与相互作用和自旋都无关的情形, 并取 $\lambda = \lambda' = \underline{p}$, 则由上式可得

$$g(\underline{p}, \mathrm{i}\omega_n) = \frac{1}{Z}\sum_{\nu N\nu'}\mathrm{e}^{-\beta(E_{N\nu}-\mu N)}$$

$$\cdot\left(\frac{|\langle\nu',N+1|\hat{c}^{+}_{\underline{p}\alpha}|\nu N\rangle|^2}{\mathrm{i}\omega_n-E_{N+1,\nu'}+E_{N\nu}+\mu}\mp\frac{|\langle\nu N|\hat{c}^{+}_{\underline{p}\alpha}|\nu',N-1\rangle|^2}{\mathrm{i}\omega_n-E_{N\nu}+E_{N-1,\nu'}+\mu}\right)\tag{3.5.2}$$

进一步将纯虚数值 $\mathrm{i}\omega_n$ 延拓到整个复平面, 有

$$g(\underline{p},z)=\frac{1}{Z}\sum_{\nu N\nu'}\mathrm{e}^{-\beta(E_{N\nu}-\mu N)}\left(\frac{|\langle\nu',N+1|\hat{c}^{+}_{\underline{p}\alpha}|\nu N\rangle|^2}{z-E_{N+1,\nu'}+E_{N\nu}+\mu}\mp\frac{|\langle\nu N|\hat{c}^{+}_{\underline{p}\alpha}|\nu',N-1\rangle|^2}{z-E_{N\nu}+E_{N-1,\nu'}+\mu}\right)\tag{3.5.3}$$

很明显, 这个新的 g 满足如下性质:

(1) 它在沿虚轴的无穷点集 $\{\mathrm{i}\omega_n\}$ 上等于旧的 g;

(2) 奇点仅在实轴上, 除此之外它在全复平面上解析;

(3) 当 $|z|\to\infty$ 时, 它趋于零.

性质 (2) 由于能量本征值和化学势均是实数, 性质 (3) 是由于式 (3.5.3) 在 $|z|\to\infty$ 时给出 $\lim\limits_{z\to\infty}g(z,\underline{p})=z^{-1}\langle\hat{c}_{\underline{p}\alpha}\hat{c}^{+}_{\underline{p}\alpha}\mp\hat{c}^{+}_{\underline{p}\alpha}\hat{c}_{\underline{p}\alpha}\rangle=z^{-1}$.

特别地, 这个新的 g 是满足性质 (1)∼ 性质 (3) 的 “唯一” 函数 (参见 Titchmarsh E C. The Theory of Functions. Oxford: Oxford University Press, 1939: 131).

这意味着如果我们用某种方法 (如某种近似方法) 计算出了 $g(\underline{p},\mathrm{i}\omega_n)$, 那么就可以通过作替代 $\mathrm{i}\omega_n\to z$ 来得到 $g(\underline{p},z)$, 只要保证所得函数能满足性质 (2) 和性质 (3) 即可. 注意这个保证不一定是平庸的, 例如, 由于对于 $g(\underline{p},\mathrm{i}\omega_n)$ 上的所有点都有 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta\omega_n}=\pm1$, 所以为了满足性质 (2) 和性质 (3), 我们也许不得不加上因子 $\pm\mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta\omega_n}$ 以便得到所需函数.

从 $g(\underline{p},z)$ 可以得到三种新的被广泛应用的实时温度格林函数. 首先考虑

$$g_{\mathrm{r}}(\underline{p},t-t')=\int_{-\infty+\mathrm{i}\delta}^{\infty+\mathrm{i}\delta}\frac{\mathrm{d}z}{2\pi}g(\underline{p},z)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}z(t-t')}\tag{3.5.4}$$

其中, $\delta\to0^+$, 即路径刚好在实轴的上方, 如图 3.5.1(a) 所示.

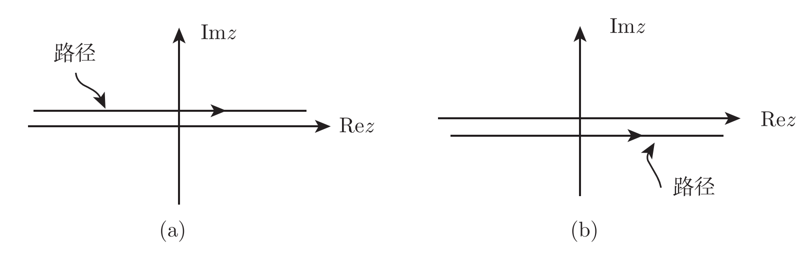


图 3.5.1　积分路径的选取

可以证明有

$$g_{\mathrm{r}}(\underline{p},t-t')=-\mathrm{i}\theta(t-t')\langle[\hat{c}_{\underline{p}}(t),\hat{c}^{+}_{p}(t')]_{\mp}\rangle\tag{3.5.5}$$

它称为**推迟格林函数**.

证明 当 $t-t'<0$ 时, 可将原积分路径与无穷大上半圆周一起构成围道, 由于围道内被积函数解析 (因为式 (3.5.3) 表明极点在实轴上), 故围道积分为零. 由此可知

$$g_{\mathrm{r}}(\underline{p},t-t')=0 \quad (t<t') \tag{3.5.6}$$

当 $t-t'>0$ 时, 可将原积分路径与无穷大下半圆周一起构成围道, 利用残数定理, 得

$$\begin{aligned}
g_{\mathrm{r}}(\underline{p},t-t')=&-\frac{\mathrm{i}}{Z}\sum_{\nu\nu'N}\mathrm{e}^{-\beta(E_{N\nu}-\mu N)}\cdot\Big[|\langle\nu'N+1|\hat{c}_{\underline{p}}^{+}|\nu N\rangle|^{2}\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(t-t')(E_{N+1,\nu'}-E_{N\nu}-\mu)}\\
&\mp|\ \langle\nu N|\hat{c}_{\underline{p}}^{+}|\nu'N-1\rangle|^{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(t-t')(E_{N\nu}-E_{N-1,\nu'}-\mu)}\Big]\\
=&-\frac{\mathrm{i}}{Z}\sum_{\nu\nu'N}\mathrm{e}^{-\beta(E_{N\nu}-\mu N)}\ \Big[\langle\nu N|\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_{N\nu}-\mu N)t}\hat{c}_{\underline{p}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_{N+1,\nu'}-\mu(N+1))t}|\nu',N+1\rangle\\
&\cdot\langle\nu',N+1|\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_{N+1,\nu'}-\mu(N+1))t'}\hat{c}_{\underline{p}}^{+}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_{N\nu}-\mu N)t'}|\nu N\rangle\\
&\mp\langle\nu N|\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_{N\nu}-\mu N)t'}\hat{c}_{\underline{p}}^{+}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_{N-1,\nu'}-\mu(N-1))t'}|\nu',N-1\rangle\\
&\cdot\langle\nu',N-1|\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_{N-1,\nu'}-\mu(N-1))t}\hat{c}_{\underline{p}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_{N\nu}-\mu N)t}|\nu N\rangle\Big]\\
=&-\mathrm{i}\langle[\hat{c}_{\underline{p}}(t),\hat{c}_{\underline{p}}^{+}(t')]_{\mp}\rangle
\end{aligned}$$

故式 (3.5.5) 成立.

类似地, 若让积分路径刚好在实轴的下方, 如图 3.5.1(b) 所示, 则可得到**超前格林函数**

$$\begin{aligned}
g_{\mathrm{a}}(\underline{p},t-t')&=\int_{-\infty-\mathrm{i}\delta}^{\infty-\mathrm{i}\delta}\frac{\mathrm{d}z}{2\pi}g(\underline{p},z)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}z(t-t')}\\
&=\mathrm{i}\theta(t'-t)\langle[\hat{c}_{\underline{p}}(t),\hat{c}_{\underline{p}}^{+}(t')]_{\mp}\rangle
\end{aligned} \tag{3.5.7}$$

它们的傅里叶变换为

$$g_{(\mathrm{r,a})}(\underline{p},t-t')=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}g_{(\mathrm{r,a})}(\underline{p},\omega)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t')} \tag{3.5.8}$$

与式 (3.5.4) 和式 (3.5.7) 比较可知

$$g_{(\mathrm{r,a})}(\underline{p},\omega)=g(\underline{p},\omega\pm\mathrm{i}0^{+}) \tag{3.5.9}$$

显然, 一旦我们通过某种方法得到了 $g(\underline{p},z)$, 那么就可用式 (3.5.9) 求得推迟及超前格林函数.

还可以定义**因果格林函数**$g_{\mathrm{c}}(\underline{p},t-t')$, 它的积分路径的选取如下, 在对式 (3.5.3) 等号右边第一项积分时应沿着刚好在实轴上方的路径, 而在对右边第二项积分时应

沿着刚好在实轴下方的路径. 因果格林函数积分路径的这种选取方法也可用另一种等价的表述形式, 即把第一项中的极点移到刚好在实轴下方, 而把第二项中的极点移到刚好在实轴上方, 然后积分就沿着实轴进行:

$$g_{\rm c}(\underline{p},t-t')=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{{\rm d}\omega}{2\pi}\frac{1}{Z}\sum_{\nu N\nu'}{\rm e}^{-\beta(E_{N\nu}-\mu N)}\left(\frac{|\langle\nu',N+1|\hat{c}^{+}_{\underline{p}\alpha}|\nu N\rangle|^2}{\omega+{\rm i}0^{+}-E_{N+1,\nu'}+E_{N\nu}+\mu}\right.$$
$$\left.\mp\frac{|\langle\nu N|\hat{c}^{+}_{\underline{p}\alpha}|\nu',N-1\rangle|^2}{\omega-{\rm i}0^{+}-E_{N\nu}+E_{N-1,\nu'}+\mu}\right){\rm e}^{-{\rm i}\omega(t-t')} \tag{3.5.10}$$

由上式不难得知

$$g_{\rm c}(\underline{p},t-t')=-{\rm i}\langle T\hat{c}_{\underline{p}}(t)\hat{c}^{+}_{\underline{p}}(t')\rangle \tag{3.5.11}$$

与零温格林函数情形相同, 所有实时温度格林函数在实轴附近的奇点位置包含了体系元激发的重要信息, 并且自能的实部和虚部分别对应了准粒子的能量修正和衰变宽度, 这同样可借助于谱密度函数的分析来确认 (参见第二章第四节或第五章第三节).

除了上述三种实时格林函数外, 在非平衡问题中还会遇到另外不同的实时格林函数. 第四章中将要讨论有关各种实时格林函数的进一步的性质和它们之间的相互关系.

第六节　应用: 电子–声子相互作用的图形法则

作为图形微扰论的一种特殊应用, 我们建立电子–声子相互作用体系的图形法则. 以下仅讨论应用中更为方便的动量空间中的费曼规则.

首先计算声子的自由传播子. 这里必须注意两点:

(1) 对于声子体系, 其化学势 $\mu=0$;

(2) 声子场算符的定义: 本来可直接将位移矢量算符 $\underline{u}_\nu(\underline{R},t)$ 定义为坐标空间中的声子场算符 (参见式 (1.4.35)), 但通过另外引进适当定义的场算符, 可使得相互作用哈密顿能够有更为简单方便的形式.

由电子–声子相互作用哈密顿式 (1.4.49) 知, 可定义动量空间中的声子场算符为

$$\hat{Q}_{\tilde{q}}\equiv\hat{b}_{\tilde{q}}+\hat{b}^{+}_{-\tilde{q}} \tag{3.6.1}$$

其中, $\tilde{q}$ 仍为第一章中所定义的混合指标. 这样声子自由传播子为

$$d^0(\tilde{q},\tau)\equiv-\langle T\hat{Q}_{\tilde{q}}(\tau)\hat{Q}^{+}_{\tilde{q}}\rangle_0 \tag{3.6.2}$$

利用

$$\langle \hat{b}_{\tilde{q}}^{+} \hat{b}_{\tilde{q}} \rangle_0 = n_{\mathrm{B}}(\omega_{\tilde{q}}) = \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta\omega_{\tilde{q}}} - 1}$$

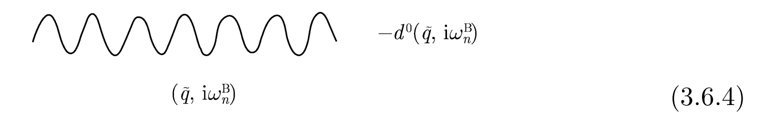
以及

$$\omega_{-\tilde{q}} = \omega_{\tilde{q}}, \quad \hat{b}_{\tilde{q}}(\tau) = \mathrm{e}^{-\omega_{\tilde{q}}\tau} \hat{b}_{\tilde{q}}, \quad d^0(\tilde{q}, \mathrm{i}\omega_n^{\mathrm{B}}) = \int_0^\beta \mathrm{d}\tau \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n^{\mathrm{B}}\tau} d^0(\tilde{q}, \tau)$$

其中, $\omega_n^{\mathrm{B}} \equiv \dfrac{2n\pi}{\beta}$ 是玻色子的松原频率, 而费米子的松原频率用 $\omega_n^{\mathrm{F}} \equiv \dfrac{(2n+1)\pi}{\beta}$ 表示. 可得

$$d^0(\tilde{q}, \mathrm{i}\omega_n^{\mathrm{B}}) = \frac{2\omega_{\tilde{q}}}{(\mathrm{i}\omega_n^{\mathrm{B}})^2 - \omega_{\tilde{q}}^2} = \frac{1}{\mathrm{i}\omega_n^{\mathrm{B}} - \omega_{\tilde{q}}} - \frac{1}{\mathrm{i}\omega_n^{\mathrm{B}} + \omega_{\tilde{q}}} \tag{3.6.3}$$

其费曼图表示为



(3.6.4)

另一个基本费曼图是相互作用顶角, 它取决于相互作用哈密顿的具体形式. 现在考虑如下简化情形:

(1) 基底原子数 $r = 1$. 这样 μ 只有一个分支, 即**声学支**. 进一步由式 (1.4.50) 可知, 此时只有纵极化 $\lambda = ||$ 才有非零贡献. 这样混合指标 $\tilde{q}$ 就约化成简单的动量指标 $\underline{q}$ 了.

对于声学支, 有

$$\omega_{\underline{q}\lambda} = v_\lambda |\underline{q}| \tag{3.6.5}$$

其中, v_λ 是极化 λ 方向上的声速.

(2) 忽略倒逆过程. 由 $\underline{K} = 0$ 可知 $\underline{q}' = -\underline{q}$.

这样, 电子–声子相互作用哈密顿就可以写成

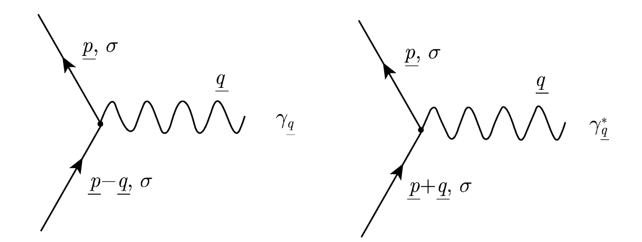
$$\hat{H}_{\mathrm{ep}} = \sum_{\underline{q}\,\underline{p}\sigma} \gamma_{\underline{q}} \hat{c}_{\underline{p}\sigma}^{+} \hat{c}_{\underline{p}-\underline{q},\sigma} \left(\hat{b}_{\underline{q}} + \hat{b}_{-\underline{q}}^{+} \right) \tag{3.6.6}$$

其中, $\hat{b}_{\underline{q}}$ 是纵声子的消灭算符, 且通过移动坐标原点后, 有

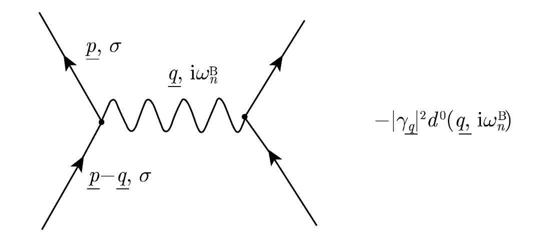
$$\gamma_{\underline{q}} = -\frac{\mathrm{i}}{\Omega} |\underline{q}| \sqrt{\frac{1}{2NM\omega_{\underline{q}}}} V_{\mathrm{ei}}(-\underline{q}) \tag{3.6.7}$$

式中, $\gamma_{\underline{q}} = \gamma_{-\underline{q}}^{*}$; $\omega_{\underline{q}} \equiv \omega_{\underline{q}||}$. 在每个顶角上均满足动量守恒.

相互作用顶角的费曼图可以表述为



将这两个费曼图结合起来, 就可得到两个电子交换一个声子的费曼图:



这样交换一个声子就引起一个有效互作用

$$V_{\text{eff}}(\underline{q},z)=|\gamma_{\underline{q}}|^2\frac{2\omega_{\underline{q}}}{(z)^2-\omega_{\underline{q}}^2} \tag{3.6.8}$$

在只有电子–声子相互作用情况下, 必须注意如下两点: ① 只有偶阶图才有贡献, 这是因为每个顶点只有一个声子算符, 这样奇数个顶点的声子算符将无法配对而导致期待值为零; ② 由式 (3.6.5) 知, 当 $\underline{q}=0$ 时, $\omega_{\underline{q}\lambda}=0$, 因而 $\hat{H}^{\text{ph}}$ 中不含 $\underline{q}=0$ 的声子. 可见 $\underline{q}=0$ 的声子并不代表真正的声子, 事实上它只表示晶体的平移或均匀应变. 因此以后我们将在费曼图中不包括这些项.

例 1　只有电子–声子相互作用时, 玻恩近似(领头阶近似) 下的电子自能.

不难看出此时的电子格林函数的 $2n$ 阶费曼图和只有两两相互作用电子体系的格林函数的 n 阶费曼图相同, 唯一的改变只是将虚线改为波纹线.

注意: 微扰级数前的展开因子中的 $\dfrac{1}{(2n)!}$ 同样会被 $2n$ 个顶角的置换效应所消除 (拓扑等价的图只画一个).

由于 Dyson 方程同样成立, 所以玻恩近似下需要考虑的费曼图只有如图 3.6.1 所示的图.

图 3.6.1 中, $p\equiv(\underline{p},\mathrm{i}\omega_n^{\mathrm{F}})$, $q\equiv(\underline{q},\mathrm{i}\omega_n^{\mathrm{B}})$. 只要我们计算出其自能贡献, 就可以得出电子格林函数. 由式 (3.3.9) 知玻恩近似下应有

$$-g=-g^0+(-g^0)(-\Sigma)(-g^0)$$

所以

$$-\Sigma(p) = \frac{1}{\beta} \sum_{\underline{q}, \omega_n^{\mathrm{B}}} |\gamma_{\underline{q}}|^2 \left[-g^0(p-q)\right] \left[-d^0(q)\right]$$

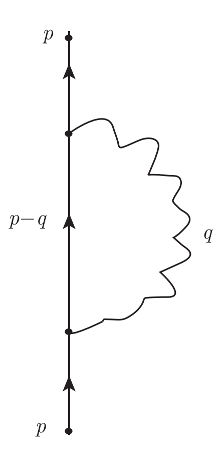


图 3.6.1 玻恩近似下的电子自能

故

$$\Sigma(p) = -\frac{1}{\beta} \sum_{\underline{q}, \omega_n^{\mathrm{B}}} |\gamma_{\underline{q}}|^2 \frac{1}{\mathrm{i}\omega_n^{\mathrm{F}} - \mathrm{i}\omega_n^{\mathrm{B}} - \varepsilon_{\underline{p}-\underline{q}}} \left(\frac{1}{\mathrm{i}\omega_n^{\mathrm{B}} - \omega_{\tilde{q}}} - \frac{1}{\mathrm{i}\omega_n^{\mathrm{B}} + \omega_{\tilde{q}}} \right) \tag{3.6.9}$$

首先看式 (3.6.9) 右边第一项, 利用式 (3.2.36) 得

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{\beta} \sum_{\underline{q}, \omega_n^{\mathrm{B}}} |\gamma_{\underline{q}}|^2 \frac{1}{\mathrm{i}\omega_n^{\mathrm{F}} - \mathrm{i}\omega_n^{\mathrm{B}} - \varepsilon_{\underline{p}-\underline{q}}} \frac{1}{\mathrm{i}\omega_n^{\mathrm{B}} - \omega_{\tilde{q}}} \\
= & -\sum_{\underline{q}} |\gamma_{\underline{q}}|^2 \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \int_C \mathrm{d}z n_{\mathrm{B}}(z) \frac{1}{\mathrm{i}\omega_n^{\mathrm{F}} - z - \varepsilon_{\underline{p}-\underline{q}}} \frac{1}{z - \omega_{\tilde{q}}} \\
= & -\sum_{\underline{q}} |\gamma_{\underline{q}}|^2 \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \int_{C'} \mathrm{d}z n_{\mathrm{B}}(z) \frac{1}{\mathrm{i}\omega_n^{\mathrm{F}} - z - \varepsilon_{\underline{p}-\underline{q}}} \frac{1}{z - \omega_{\tilde{q}}}
\end{aligned} \tag{3.6.10}$$

其中, 积分路径 C 和 C' 如图 3.6.2 所示.

注意

$$\frac{1}{\mathrm{i}\omega_n^{\mathrm{F}} - z - \varepsilon_{\underline{p}-\underline{q}}} \frac{1}{z - \omega_{\tilde{q}}} = \left[\frac{1}{z - \omega_{\tilde{q}}} - \frac{1}{z - (\mathrm{i}\omega_n^{\mathrm{F}} - \varepsilon_{\underline{p}-\underline{q}})} \right] \frac{1}{\mathrm{i}\omega_n^{\mathrm{F}} - (\omega_{\tilde{q}} + \varepsilon_{\underline{p}-\underline{q}})}$$

则积分得

$$\Sigma(p) = \sum_{\underline{q}} |\gamma_{\underline{q}}|^2 \left[\frac{n_{\mathrm{B}}(\omega_{\tilde{q}}) - n_{\mathrm{B}}(\mathrm{i}\omega_n^{\mathrm{F}} - \varepsilon_{\underline{p}-\underline{q}})}{\mathrm{i}\omega_n^{\mathrm{F}} - (\omega_{\tilde{q}} + \varepsilon_{\underline{p}-\underline{q}})} - \{\omega_{\tilde{q}} \to -\omega_{\tilde{q}}\} \right]$$

但 $n_{\mathrm{B}}(\mathrm{i}\omega_n^{\mathrm{F}} - \varepsilon_{\underline{p}-\underline{q}}) = n_{\mathrm{F}}(\varepsilon_{\underline{p}-\underline{q}}) - 1$, 所以

$$\Sigma(p) = \sum_{\underline{q}} |\gamma_{\underline{q}}|^2 \left[\frac{1 + n_{\mathrm{B}}(\omega_{\tilde{q}}) - n_{\mathrm{F}}(\varepsilon_{\underline{k}-\underline{q}})}{\mathrm{i}\omega_n^{\mathrm{F}} - (\omega_{\tilde{q}} + \varepsilon_{\underline{k}-\underline{q}})} - \{\omega_{\tilde{q}} \to -\omega_{\tilde{q}}\} \right] \tag{3.6.11}$$

再利用 $n_{\mathrm{B}}(\omega_{\tilde{q}}) = -1 - n_{\mathrm{B}}(-\omega_{\tilde{q}})$, 得

$$\Sigma(\underline{p}, z) = \sum_{\underline{q}} |\gamma_{\underline{q}}|^2 \left[\frac{1 + n_{\mathrm{B}}(\omega_{\tilde{q}}) - n_{\mathrm{F}}(\varepsilon_{\underline{p}-\underline{q}})}{z - (\varepsilon_{\underline{p}-\underline{q}} + \omega_{\tilde{q}})} + \frac{n_{\mathrm{B}}(\omega_{\tilde{q}}) + n_{\mathrm{F}}(\varepsilon_{\underline{p}-\underline{q}})}{z - (\varepsilon_{\underline{p}-\underline{q}} - \omega_{\tilde{q}})} \right] \tag{3.6.12}$$

其中, 我们已经将自能函数解析延拓到了复平面.

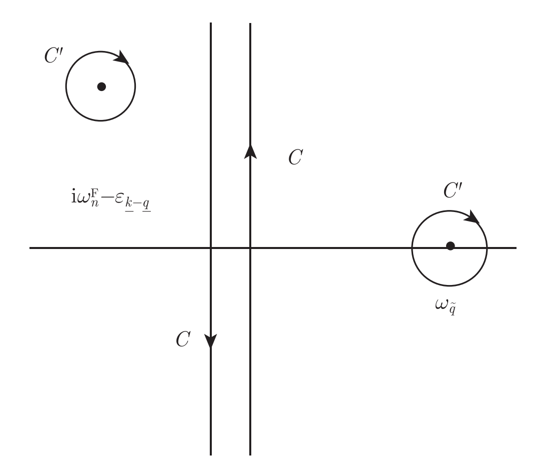


图 3.6.2　积分路径 C 和 C'

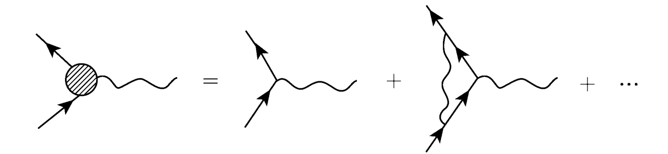
例 2　Migdal 定理.

作为前面所建立的电子–声子相互作用图形法则的应用, 我们来证明 **Migdal 定理**: 对于电子–声子相互作用顶角的修正, 每增加一根内声子线, 将增加一个衰减因子 $\dfrac{\omega_{\mathrm{D}}}{\varepsilon_{\mathrm{F}}} \approx \sqrt{\dfrac{m}{M}}$, 其中, m 是电子质量, M 是离子质量, ω_{D} 是德拜频率.

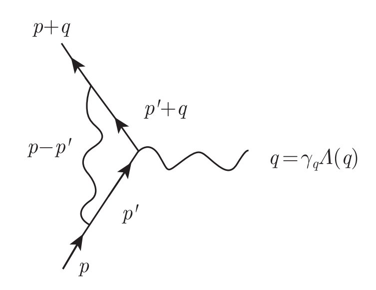
电子自能可以用下列图形展开表示:

Σ = … = … + … + ⋯

其中, 小阴影圆圈部分代表顶角部分, 其图形展开表示如下:



现在考虑领头阶顶角修正:



$$\gamma_{\underline{q}}\Lambda(q)=\frac{1}{\beta V}\sum_{p'(\underline{p}',\mathrm{i}\omega_n')}\gamma_{\underline{q}}\left(-|\gamma_{\underline{p}-\underline{p}'}|^2\right)d_0(p-p')g_0(p')g_0(p'+q)$$

在低温情形, 我们可以取 $\dfrac{1}{\beta}\sum\limits_{\omega_n'}\rightarrow\displaystyle\int\frac{\mathrm{d}\omega_n'}{2\pi}$, 故

$$\Lambda(q)=-\int\frac{\mathrm{d}\omega_n'}{2\pi}\frac{\mathrm{d}^3p'}{(2\pi)^3}|\gamma_{\underline{p}-\underline{p}'}|^2d_0(p-p')g_0(p')g_0(p'+q)\tag{3.6.13}$$

其中, 声子传播子

$$d_0(p-p')=-\frac{2\omega_{p-p'}}{(\omega_n-\omega_n')^2+\omega_{p-p'}^2}\tag{3.6.14}$$

现在估计 $\Lambda(q)$ 的大小. 首先注意到当 ω_n' 比德拜频率ω_{D} 大时, d_0 将按 $(\omega_n')^{-2}$ 减小, 所以对 ω_n' 的积分有主要贡献的区域亦在 ω_{D} 的数量级. 所以

$$\Lambda(q)=-\int_{-\omega_{\mathrm{D}}}^{\omega_{\mathrm{D}}}\frac{\mathrm{d}\omega_n'}{2\pi}\int\frac{\mathrm{d}^3p'}{(2\pi)^3}|\gamma_{\underline{p}-\underline{p}'}|^2d_0(p-p')g_0(p')g_0(p'+q)\tag{3.6.15}$$

式 (3.6.7) 中

$$\frac{1}{\Omega}V_{\mathrm{ei}}(-\underline{q})=\frac{1}{\Omega}\int\mathrm{d}^3xV_{\mathrm{ei}}(\underline{x})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{q}\cdot\underline{x}}\equiv C\tag{3.6.16}$$

对于一些典型的金属:

$$C\sim\varepsilon_{\mathrm{F}}$$

$$\frac{\gamma_{2p_{\rm F}}^2}{a^3\omega_{\rm D}} \sim \frac{1}{a^3\omega_{\rm D}}\left[\frac{a^3}{2M\omega_{\rm D}}(2p_{\rm F})^2(\varepsilon_{\rm F})^2\right] \sim \frac{\varepsilon_{\rm F}^2}{\omega_{\rm D}^2}\frac{p_{\rm F}^2}{2M} \tag{3.6.17}$$

式中, $N = V/a^3 \sim a^{-3}$(为方便已取 $V = 1$); 对德拜频率的近似估计为 $\omega_{\rm D} \sim \sqrt{K/M}$, 其中, $Ka^2/2 \sim \varepsilon_{\rm F}$, 所以 $\omega_{\rm D}^2 \sim \varepsilon_{\rm F}/(a^2M)$. 注意到 $\dfrac{1}{ma^2} \sim \dfrac{p_{\rm F}^2}{m} \sim \varepsilon_{\rm F}$, 所以

$$\frac{\omega_{\rm D}^2}{\varepsilon_{\rm F}^2} \sim \frac{1}{\varepsilon_{\rm F}a^2M} \sim \frac{m}{M} \tag{3.6.18}$$

代入式 (3.6.17), 得

$$\frac{\gamma_{2p_{\rm F}}^2}{a^3\omega_{\rm D}} \sim \frac{p_{\rm F}^2}{2m} \sim \varepsilon_{\rm F} \tag{3.6.19}$$

这样由式 (3.6.15), 有

$$\Lambda(q) \sim \omega_{\rm D}p_{\rm F}^3a^3\omega_{\rm D}\varepsilon_{\rm F}\frac{1}{\omega_{\rm D}}\frac{1}{\varepsilon_{\rm F}}\frac{1}{\varepsilon_{\rm F}} \sim \frac{\omega_{\rm D}}{\varepsilon_{\rm F}}(p_{\rm F}a)^3 \sim \frac{\omega_{\rm D}}{\varepsilon_{\rm F}}$$

其中利用了 $(p_{\rm F}a)^3 \sim 1$, 所以

$$\Lambda(q) \sim \sqrt{\frac{m}{M}} \sim 10^{-2} \tag{3.6.20}$$

由此可见, 在计算顶角时, 只要取最低阶近似就可以了. 根据以上对 Migdal 定理的证明过程可以看出, 它本质上是一个量纲分析, 因而尽管通常它是成立的, 但也存在一些例外情形 (例如, 参见 Schrieffer J R. Theory of Superconductivity. New York: Benjamin, 1964 等.), 在这些情形中, Migdal 定理是不充分的.

第四章　非平衡体系的格林函数

第一节　为何引入回路序格林函数

现在考虑这样一个非平衡体系, 它在如下形式的哈密顿下演化:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'_t$$

其中, $\hat{H}_0$ 是无相互作用哈密顿; $\hat{H}'_t$ 是显含时间的相互作用哈密顿.

传统的格林函数应用于非平衡问题时, 会遇到这样或那样的困难. 首先是有限温度下的虚时格林函数 (又叫松原函数), 尽管它适于研究系统的热平衡态的性质而且也能应用图形微扰技术, 但它对非平衡体系的研究是不合适的. 因为整个松原函数方法是建立在温度基础之上的, 但对于非平衡体系却不存在对于温度的热力学基础. 所以迄今为止还没有发现能将松原函数推广到非平衡过程的方法. 其次是实时格林函数, 虽然它们可以讨论非平衡态性质, 但它们在非平衡问题中都不能直接应用微扰展开方法. 我们以时序格林函数(time ordered Green function) 为例来加以说明. 这种特殊的实时格林函数 g_T 的定义是

$$\mathrm{i}g_T(t,t') \equiv \langle T[\hat{\Psi}(t)\hat{\Psi}^+(t')]\rangle \tag{4.1.1}$$

其中, 右端的符号 T 称为编时算符. 由于本节下面的讨论与自旋和空间坐标无关, 为简单起见, 暂不考虑自旋和空间坐标.

(1) 在零温的平衡情形时:

$$\hat{\Psi}(t) \equiv \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t}\hat{\Psi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t} \tag{4.1.2}$$

符号

$$\langle\cdots\rangle \equiv \left\langle \psi_0^{(\mathrm{H})}|\cdots|\psi_0^{(\mathrm{H})}\right\rangle \tag{4.1.3}$$

代表对相互作用体系的基态 $|\psi_0^{(\mathrm{H})}\rangle$ 求平均.

(2) 在有限温度的平衡情形:

$$\hat{\Psi}(t) \equiv \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\hat{H}-\mu\hat{N})t}\hat{\Psi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\hat{H}-\mu\hat{N})t} \tag{4.1.4}$$

而符号

$$\langle\cdots\rangle \equiv \frac{\mathrm{tr}(\hat{\rho}\cdots)}{\mathrm{tr}\hat{\rho}} \equiv \frac{1}{Z}\mathrm{tr}(\hat{\rho}\cdots) \tag{4.1.5}$$

代表对巨正则系综求热力学平均. 其中, 密度矩阵为 $\hat{\rho} \equiv \mathrm{e}^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}$, 而 $Z \equiv \mathrm{tr}\hat{\rho}$ 为巨配分函数.

(3) 在接近平衡的非平衡情形, 我们可近似地采用 (1) 和 (2) 中的处理方法. 但是在远离平衡的非平衡情形, 符号 $\langle\cdots\rangle$ 代表对体系可能的任何量子态求平均, 但体系的状态空间依赖于体系近期的历史以及诸如能量守恒之类的动力学约束. 目前对非平衡体系的 $\langle\cdots\rangle$ 的意义还了解甚少.

为了进行微扰展开, 需要将海森伯表象变换到相互作用表象. 可得到

$$\mathrm{i}g_T(t,t') = {}_0\Big\langle S(-\infty,\infty)T\left[\hat{\Psi}_\mathrm{I}(t)\hat{\Psi}_\mathrm{I}^+(t')S(\infty,-\infty)\right]\Big\rangle_0 \tag{4.1.6}$$

其中, 在零温时

$${}_0\langle\cdots\rangle_0 \equiv \langle\varphi_0|\cdots|\varphi_0\rangle \tag{4.1.7}$$

代表对自由粒子系统的基态 $|\varphi_0\rangle$ 求平均. 在有限温度时, 若体系在 $t_0=-\infty$ 时处于无相互作用状态, 则

$${}_0\langle\cdots\rangle_0 \equiv \frac{1}{Z_0}\mathrm{tr}(\hat{\rho}_0\cdots) \tag{4.1.8}$$

其中

$$\hat{\rho}_0 = \hat{\rho}(-\infty) = \mathrm{e}^{-\beta(\hat{H}_0-\mu\hat{N})}, \quad Z_0 = \mathrm{tr}\hat{\rho}_0 \tag{4.1.9}$$

以上各式中的 $S(\infty,-\infty)$ 是构建微扰论的关键量: S 矩阵. 它是相互作用表象中的时间演化算符 $S(t_f,t_0)$ 在时间 t_f, t_0 取极限时的算符, 即

$$S(\infty,-\infty) \equiv \lim_{\substack{t_f\to\infty\\ t_0\to-\infty}} S(t_f,t_0) = T\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t\hat{H}_t'(t)} \tag{4.1.10}$$

其中, $\hat{H}_t'(t) \equiv \hat{H}_{t\mathrm{I}}'(t)$ 为相互作用表象中的微扰哈密顿 (为了符号简化, 我们略去了绘景指标 I).

式 (4.1.6) 的证明如下.

零温时, 可参见第二章的推证. 现在考虑有限温度情形. 算符在 H 表象和 I 表象之间的联系为如下幺正变换:

$$\hat{\Psi}(t) = S(0,t)\hat{\Psi}_\mathrm{I}(t)S^\dagger(0,t)$$

故有

$$\hat{\Psi}(t) = S(0,t)\hat{\Psi}_\mathrm{I}(t)S(t,0)$$

因为

$$|\Psi_\mathrm{I}(0)\rangle = S(0,-\infty)|\Psi_\mathrm{I}(-\infty)\rangle$$

故

$$\hat{\rho} \equiv \hat{\rho}(0) = S(0,-\infty)\hat{\rho}_{\rm I}(-\infty)S(-\infty,0)$$

不妨设 $t > t'$($t < t'$ 情形可类似证明). 因为

$$\begin{aligned}
\mathrm{tr}\left[\hat{\rho}\hat{\Psi}(t)\hat{\Psi}^{\dagger}(t')\right] =& \mathrm{tr}\left[S(0,-\infty)\hat{\rho}_{\rm I}(-\infty)S(-\infty,0)S(0,t)\hat{\Psi}_{\rm I}(t)S(t,0)S(0,t')\hat{\Psi}_{\rm I}^{\dagger}(t')S(t',0)\right] \\
=& \mathrm{tr}\left[\hat{\rho}_{\rm I}(-\infty)S(-\infty,0)S(0,t)\hat{\Psi}_{\rm I}(t)S(t,0)S(0,t')\hat{\Psi}_{\rm I}^{\dagger}(t')S(t',0)S(0,-\infty)\right] \\
=& \mathrm{tr}\left[\hat{\rho}_{\rm I}(-\infty)S(-\infty,\infty)S(\infty,0)S(0,t)\right. \\
& \left.\cdot\hat{\Psi}_{\rm I}(t)S(t,0)S(0,t')\hat{\Psi}_{\rm I}^{\dagger}(t')S(t',0)S(0,-\infty)\right] \\
=& \mathrm{tr}\left\{\hat{\rho}_{\rm I}(-\infty)S(-\infty,\infty)T\left[\hat{\Psi}_{\rm I}(t)\hat{\Psi}_{\rm I}^{\dagger}(t')S(\infty,-\infty)\right]\right\} \\
\mathrm{tr}\hat{\rho} =& \mathrm{tr}\left[S(0,-\infty)\hat{\rho}_{\rm I}(-\infty)S(-\infty,0)\right] = \mathrm{tr}\hat{\rho}_{\rm I}(-\infty)
\end{aligned}$$

故根据式 (4.1.5), 有

$$\mathrm{i}g_T(t,t') = \left\langle T\left[\hat{\Psi}(t)\hat{\Psi}^{\dagger}(t')\right]\right\rangle = \frac{\mathrm{tr}\left\{\hat{\rho}_{\rm I}(-\infty)S(-\infty,\infty)T\left[\hat{\Psi}_{\rm I}(t)\hat{\Psi}_{\rm I}^{\dagger}(t')S(\infty,-\infty)\right]\right\}}{\mathrm{tr}\hat{\rho}_{\rm I}(-\infty)} \tag{4.1.11}$$

进一步, 在体系于 $t_0 = -\infty$ 时处于无相互作用状态的条件下, 由式 (4.1.11) 与式 (4.1.8) 和式 (4.1.9) 可直接得出式 (4.1.6).

为了应用微扰展开中重要的 Wick 定理, 需要将式 (4.1.6) 右端的平均转化成编时乘积的平均. 为此必须将式 (4.1.6) 平均中的第一个 $S(-\infty,\infty) \equiv S^{\dagger}(\infty,-\infty)$ 转移到分母中. 这在零温情形以及在绝热地 (或无限缓慢地) 引入相互作用 (即绝热近似) 时能做到. 假设当时间从 $-\infty$ 增加到 0 时, 相互作用无限慢地引入, 故有

$$t_0 = -\infty, \quad |\Psi_{\rm I}(-\infty)\rangle = |\varphi_0\rangle \tag{4.1.12}$$

同时, 设从 0 到 $+\infty$ 时相互作用无限慢地撤出. 由于无限慢地引入和撤出相互作用时, 不会引起额外的跃迁, 使得 $t_f = \infty$ 时体系仍处于无相互作用的基态. 特别是由于基态是非简并的, 故可设

$$t_f = \infty, \quad |\Psi_{\rm I}(\infty)\rangle = S(\infty,-\infty)|\varphi_0\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}L}|\varphi_0\rangle \tag{4.1.13}$$

由此知

$$\langle\varphi_0|\hat{S}(-\infty,\infty) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}L}\langle\varphi_0|$$

代入式 (4.1.6) 可得到零温微扰论中的基本公式:

$$\mathrm{i}g_T(t,t') = \frac{\left\langle\varphi_0\left|T\left[\hat{\Psi}_{\rm I}(t)\hat{\Psi}_{\rm I}^{\dagger}(t')S(\infty,-\infty)\right]\right|\varphi_0\right\rangle}{\langle\varphi_0|S(\infty,-\infty)]|\varphi_0\rangle} \tag{4.1.14}$$

然而以上所作的绝热近似假设对于很接近平衡的体系是可以接受的, 但对于一般非平衡体系却有问题 (即使是零温下). 首先, 式 (4.1.12) 意味着非平衡体系的演化可以追溯为源于某个初始平衡态, 但这在一般情形并不成立. 另外, 取 $t_0=-\infty$ 极限, 就无法讨论瞬变现象以及其他与初始关联有关的现象. 其次, 式 (4.1.13) 对非平衡体系是不可接受的, 因为没有任何保证能使体系在无穷远将来回到它在 $-\infty$ 时的初态. 例如, 当原子或分子撞击一个表面, 并与表面交换电荷时, 这样在 $t_f=\infty$ 时的终态和 $t_0=-\infty$ 时的初态很不相同. 何况只要相互作用存在, $t_f\to\infty$ 时的状态就不能很好地由无相互作用基态 $|\varphi_0\rangle$ 所描述. 在非平衡的一般情形, 我们甚至不知道无限远将来到底会发生什么.

在有限温度情形, 困难更为严重. 此时时序格林函数没有类似式 (4.1.14) 的微扰论公式. 这是因为根据式 (4.1.6) 可得

$$\mathrm{i}G_T(t,t')=\frac{1}{\varXi_0}\sum_{Nj}{}_0\langle Nj|\mathrm{e}^{-\beta(\hat{H}_0-\mu\hat{N})}S(-\infty,\infty)T\left[\hat{\varPsi}_{\mathrm{I}}(t)\hat{\varPsi}_{\mathrm{I}}^{\dagger}(t')S(\infty,-\infty)\right]|Nj\rangle_0$$

其中, $|Nj\rangle_0$ 是自由粒子系统的基态和激发态的集合. 这种有限温度导致的非简并性, 使得即使无限慢地引入和撤出相互作用, 也会引起跃迁. 故一般有

$$S(\infty,-\infty)|Nj\rangle_0\neq\mathrm{e}^{\mathrm{i}L}|Nj\rangle_0 \tag{4.1.13$'$}$$

我们无法将 $S(\infty,-\infty)$ 转移到分母中, 分子不能成为纯粹的编时乘积 ${}_0\langle T(\cdots)\rangle_0$, 无法运用 Wick 定理. 而时序格林函数之外的其他实时格林函数更不能应用微扰展开法 (即使是在零温下).

然而新的回路序格林函数(contour ordered Green function, COGF) 既是实时的又能用微扰展开直接进行. 以 COGF 为基础的 Keldysh 形式体系广泛地应用于如下任务中:

(1) 非平衡体系 (由于外场的存在或者在瞬变区域) 的处理.

(2) 与量子力学可观测量的平均值或关联函数的计算不同, 它还可用于在统计意义上的可观测量的完全计算.

(3) 在无序或玻璃状体系的理论中作为替代复制法 (replica) 及超对称法的一种不同方法.

(4) 在松原解析延拓出现困难时的平衡问题的处理.

第二节　COGF 的引入

尽管一般情形取 $t_0=-\infty$ 有问题, 但是在许多情形还是可以的, 例如, 可以研究这样的非平衡体系, 它原先处于平衡态, 在加入与时间有关的相互作用后才成为

非平衡体系. 又例如, 当人们对初始条件不感兴趣时 (正如稳态输运问题以及大多数远离平衡的体系), 通常就利用式 (4.1.12), 但我们将指出这个过程失效时的处理方法.

为了避免利用式 (4.1.13) 和式 (4.1.13′) 这样的式子, Schwinger 建议将 S 矩阵中的时间积分改为两段, 一段为 $(-\infty,\tau)$, 另一段为 $(\tau,-\infty)$, 最后可令 $\tau\to\infty$. (因为最重要的地方不是取这个极限本身, 而是不能取这个极限下的状态作为已知状态.) 这种方法使得 S 矩阵的积分路径 (见式 (4.1.10)) 是一个有序的时间回路 (可称为**Schwinger 回路**或**Keldysh 回路**), 它开始于 $t=-\infty$ 并终止于 $t=-\infty$. 如下面的时间回路图 (图 4.2.1) 所示.

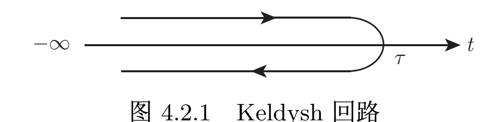


图 4.2.1　Keldysh 回路

可将这种时间回路 S 矩阵记为

$$S_c(-\infty,-\infty)\equiv T_c\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_c \mathrm{d}t\hat{H}'_t(t)} \tag{4.2.1}$$

其中, 编时算符 T_c 是按回路序 (箭头所指) 来编排的, 次序在先的算符排在次序在后的算符的右边. 这种方法可使我们能运用格林函数来描述非平衡现象. 我们唯一需要知道的是 $t_0=-\infty$ 时的状态 $|\Psi_{\mathrm{I}}(-\infty)\rangle$, 而无需知道 $t=\infty$ 时的状态 $|\Psi_{\mathrm{I}}(\infty)\rangle$. 另外, 还能够把格林函数的运动方程置于输运理论的量子玻尔兹曼方程的形式.

现在可以定义如下 COGF:

$$\mathrm{i}g(X,X')\equiv\left\langle T_c\left[\hat{\Psi}(X)\hat{\Psi}^\dagger(X')\right]\right\rangle \tag{4.2.2}$$

其中, $X\equiv(x,\sigma)\equiv(\underline{x},t;\sigma)$ 等; 这里为符号简单起见, 将自旋指标 σ 纳入 X 中, 但在与自旋无关情形我们就理解成 $X=(\underline{x},t)$. 由于时间回路包含两个分支段, 其中, 箭头指向时间正向的分支段 $C_+:(-\infty,\tau)$, 箭头指向时间负向的分支段 $C_-:(\tau,-\infty)$, 故式 (4.2.2) 包含 4 个不同的函数:

$$g(X,X')=\begin{cases} g_T(X,X') & (t,t'\in C_+)\\ g_<(X,X') & (t\in C_+,t'\in C_-)\\ g_>(X,X') & (t\in C_-,t'\in C_+)\\ g_{\tilde{T}}(X,X') & (t,t'\in C_-)\end{cases} \tag{4.2.3}$$

它们分别称为**时序 (因果) 格林函数**、**小于格林函数**、**大于格林函数**和**反时序格林函数**. 有时我们将它们的符号按所在路段位置分别记为 g^{++}(即g_T), g^{+-}(即$g_<$),

g^{-+}(即$g_>$), g^{--}(即$g_{\tilde{T}}$). 这样不难证明

$$g_>(X, X') = -\mathrm{i}\langle\hat{\Psi}(X)\hat{\Psi}^\dagger(X')\rangle \tag{4.2.4}$$

$$g_<(X, X') = \mp\mathrm{i}\langle\hat{\Psi}^\dagger(X')\hat{\Psi}(X)\rangle \tag{4.2.5}$$

$$\begin{aligned} g_T(X, X') &= -\mathrm{i}\left\langle T\left[\hat{\Psi}(X)\hat{\Psi}^\dagger(X')\right]\right\rangle \\ &= \theta(t-t')g_>(X, X') + \theta(t'-t)g_<(X, X') \end{aligned} \tag{4.2.6}$$

$$\begin{aligned} g_{\tilde{T}}(X, X') &= -\mathrm{i}\left\langle \tilde{T}\left[\hat{\Psi}(X)\hat{\Psi}^\dagger(X')\right]\right\rangle \\ &= \theta(t-t')g_<(X, X') + \theta(t'-t)g_>(X, X') \end{aligned} \tag{4.2.7}$$

其中, $\tilde{T}$ 在进行编时运算时, 应该将 t 值较大的算符视为次序较早的算符 (因为这是在反时序段 C_- 上), 也就是 t 大的算符应排在 t 小的算符的右边, 也正因为如此, 有时也将 $\tilde{T}$ 称为**反编时算符**.

以上 4 个格林函数均能借助于回路序 S 矩阵而在相互作用表象中表示出来. 事实上利用 $S_c = S_{c_-}(-\infty, \infty)S_{c_+}(\infty, -\infty)$(已取 $\tau \to \infty$), 其中, $S_{c_-}(-\infty, \infty)$ 是在时间回路的 C_- 段上的 $S(-\infty, \infty)$, $S_{c_+}(\infty, -\infty)$ 是在时间回路的 C_+ 段上的 $S(\infty, -\infty)$. 利用式 (4.2.1) 及式 (4.1.6), 可将式 (4.2.2) 写成

$$\mathrm{i}g(X, X') =_0 \left\langle T_c\left[\hat{\Psi}_\mathrm{I}(X)\hat{\Psi}_\mathrm{I}^\dagger(X')S_c\right]\right\rangle_0 \tag{4.2.8}$$

这也使得我们能利用微扰展开方法.

由于有

$$g_T + g_{\tilde{T}} = g_< + g_> \tag{4.2.9}$$

故这 4 个函数中仅有 3 个线性无关的函数, 这使得人们有一定的选择自由. 最适合我们目的的函数为 $g_<$、$g_>$ 以及下面定义的推迟格林函数g_r(或超前格林函数g_a).

$$\begin{aligned} g_\mathrm{r}(X, X') &= -\mathrm{i}\theta(t-t')\left\langle\left[\hat{\Psi}(X), \hat{\Psi}^\dagger(X')\right]_\mp\right\rangle \\ &= \theta(t-t')\left[g^>(X, X') - g^<(X, X')\right] \end{aligned} \tag{4.2.10}$$

$$\begin{aligned} g_\mathrm{a}(X, X') &= \mathrm{i}\theta(t'-t)\left\langle\left[\hat{\Psi}(X), \hat{\Psi}^\dagger(X')\right]_\mp\right\rangle \\ &= \theta(t'-t)\left[g^<(X, X') - g^>(X, X')\right] \end{aligned} \tag{4.2.11}$$

根据以上各种格林函数的定义, 利用公式 $\langle\phi|A|\psi\rangle^* = \langle\psi|A^+|\phi\rangle$, 可直接证明有反厄米共轭关系

$$g_T(X, X') = -[g_{\tilde{T}}(X', X)]^* \tag{4.2.12}$$

$$g_<(X,X') = -[g_<(X',X)]^*, \quad g_>(X,X') = -[g_>(X',X)]^* \tag{4.2.13}$$

以及厄米共轭关系

$$g_{\rm r}(X,X') = [g_{\rm a}(X',X)]^* \tag{4.2.14}$$

对于具有空间均匀性的稳定态, 所有格林函数仅依赖于变量之间的差值, 从而具有相应的傅里叶分量, 它们满足

$$g_T(\vec{p},\omega) = -[g_{\tilde{T}}(\vec{p},\omega)]^*, \quad g_{\rm r}(\vec{p},\omega) = [g_{\rm a}(\vec{p},\omega)]^* \tag{4.2.15}$$

以式 (4.2.15) 中的第二个式子为例加以证明. 因

$$g_{\rm a}(\vec{p},\omega) = \int {\rm d}^4(X-X'){\rm e}^{{\rm i}K\cdot(X-X')}g_{\rm a}(X-X')$$

所以有

$$\begin{aligned}
[g_{\rm a}(\vec{p},\omega)]^* &= \int {\rm d}^4(X-X'){\rm e}^{-{\rm i}P\cdot(X-X')}[g_{\rm a}(X-X')]^* \\
&= \int {\rm d}^4(X'-X){\rm e}^{-{\rm i}P\cdot(X-X')}[g_{\rm a}(X'-X)]^* \\
&= \int {\rm d}^4(X-X'){\rm e}^{{\rm i}P\cdot(X-X')}g_{\rm r}(X-X') \\
&= g_{\rm r}(P) = g_{\rm r}(\underline{p},\omega)
\end{aligned}$$

另外, 由式 (4.2.13) 知傅里叶分量 $g_>(\vec{p},\omega)$ 和 $g_<(\vec{p},\omega)$ 都是纯虚数.

此外, 有

$$\begin{cases}
g_{\rm r} = g_T - g_< = g_> - g_{\tilde{T}} \\
g_{\rm a} = g_T - g_> = g_< - g_{\tilde{T}} \\
g_{\rm r} - g_{\rm a} = g_> - g_<
\end{cases} \tag{4.2.16}$$

利用场算符的正则对易关系, 还可以证明当 $t = t'$ 时有

$${\rm i}\,[g_>(\underline{x},t;\underline{x}',t) - g_<(\underline{x},t;\underline{x}',t)] = \delta(\underline{x}-\underline{x}') \tag{4.2.17}$$

为了后面讨论准经典近似下的输运方程 (量子玻尔兹曼方程), 引入如下的量:

$$\rho_{\alpha\beta}(\underline{x}_1,\underline{x}_2;t) \equiv \frac{1}{N}\langle\hat{\psi}^+_\beta(\underline{x}_2,t)\hat{\psi}_\alpha(\underline{x}_1,t)\rangle \tag{4.2.18}$$

其中, N 为体系的粒子数; α,β 为自旋指标. 为了了解它的物理意义, 我们考虑任意一个单粒子力学量算符:

$$\hat{F}_{\alpha\beta} \equiv \sum_{i=1}^{N}\hat{f}^{(i)}_{\alpha\beta} \tag{4.2.19}$$

其中, 上标 (i) 代表作用于第 i 个粒子的算符. 则由式 (1.3.40) 知, 它的二次量子化形式为

$$\hat{F}=\int \mathrm{d}^3x\hat{\psi}_\alpha^+(\underline{x},t)\hat{f}_{\alpha\beta}\hat{\psi}_\beta(\underline{x},t) \tag{4.2.20}$$

故

$$\begin{aligned}\langle\hat{F}\rangle=N\langle f\rangle&=N\int \mathrm{d}^3x_1\left[\hat{f}_{\alpha\beta}^{(1)}\frac{1}{N}\langle\hat{\psi}_\alpha^+(\underline{x}_2,t)\hat{\psi}_\beta(\underline{x}_1,t)\rangle\right]_{x_2=\underline{x}_1}\\&=N\int \mathrm{d}^3x_1\left[\hat{f}_{\alpha\beta}^{(1)}\rho_{\beta\alpha}(\underline{x}_1,\underline{x}_2;t)\right]_{\underline{x}_2=\underline{x}_1}\end{aligned} \tag{4.2.21}$$

由此得知, $\rho_{\alpha\beta}(\underline{x}_1,\underline{x}_2;t)$ 可以解释为一个粒子的坐标密度矩阵. 并且根据式 (4.2.18) 和式 (4.2.5) 可得

$$\rho(\underline{x}_1,\underline{x}_2;t)=\pm\frac{\mathrm{i}}{N}g_<(\underline{x}_1,t;\underline{x}_2,t) \tag{4.2.22}$$

第三节　COGF 的微扰展开

(1) 将 COGF

$$\mathrm{i}g(X,X')={}_0\!\left\langle T_c\left[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_c \mathrm{d}t_1\hat{H}_\mathrm{I}'(t_1)}\hat{\Psi}_\mathrm{I}(X)\hat{\Psi}_\mathrm{I}^\dagger(X')\right]\right\rangle_0$$

写成级数展开形式:

$$\mathrm{i}g(X,X')=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-\mathrm{i})^n}{n!}\int_c \mathrm{d}t_1\cdots\int_c \mathrm{d}t_{n0}\left\langle T_c\left[\hat{H}_\mathrm{I}'(t_1)\cdots\hat{H}_\mathrm{I}'(t_n)\hat{\Psi}_\mathrm{I}(X)\hat{\Psi}_\mathrm{I}^\dagger(X')\right]\right\rangle_0 \tag{4.3.1}$$

它与零温时序格林函数有相似的结构, 这也可以从式 (4.2.2) 看出, 它们仅在编时的规定上有一小的差异. 从而可以运用 Wick 定理, 并且一样只需考虑联通格林函数的贡献, 零温时序格林函数的费曼图规则对 COGF也基本适用, 只需要在 COGF情形, 将每个顶角对时间从 $-\infty$ 到 ∞ 的积分改为对时间回路 C 的积分. 当式 (4.3.1) 右端算符按 Wick 定理成对收缩时, 每对中都有一定时间变量, 如 $g^{(0)}(t_i,t_j)$(标号 (0) 代表自由传播子). 若 t_i,t_j 都在时间段 C_+ 上, 则该收缩是时序格林函数 $g_T^{(0)}(g^{(0)++})$; 若 t_i,t_j 都在时间段 C_- 上, 则该收缩是反时序格林函数 $g_{\tilde{T}}^{(0)}(g^{(0)--})$; 若一个在 C_+ 上另一个在 C_- 上, 则该收缩将是 $g_<^{(0)}(g^{(0)+-})$ 或 $g_>^{(0)}(g^{(0)-+})$.

例 1　设有一零温费米子体系, 粒子仅与外场相互作用, 且

$$\hat{H}_t'(t)=\int \mathrm{d}^3x\hat{\Psi}_\mathrm{I}^+(X)U(X)\hat{\Psi}_\mathrm{I}(X) \tag{4.3.2}$$

考虑小于格林函数 $g_<$ 的 S 矩阵展开的一阶近似. 其费曼图为

$$\mathrm{i}g_<(X,X') = \mathrm{i}g_<^{(0)}(X,X') + \int \mathrm{d}^3x_1 \int_c \mathrm{d}t_1 \mathrm{i}g^{(0)}(X,X_1)(-\mathrm{i})U(X_1)\mathrm{i}g^{(0)}(X_1,X')$$

$$\begin{aligned} g_<(X,X') =& g_<^{(0)}(X,X') + \int \mathrm{d}^3x_1 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t_1 g_T^{(0)}(X,X_1)U(X_1)g_<^{(0)}(X_1,X') \\ &+ \int \mathrm{d}^3x_1 \int_{\infty}^{-\infty} \mathrm{d}t_1 g_<^{(0)}(X,X_1)U(X_1)g_{\tilde{T}}^{(0)}(X_1,X') \\ =& g_<^{(0)}(X,X') + \int \mathrm{d}^3x_1 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t_1 \Big[g_T^{(0)}(X,X_1)U(X_1)g_<^{(0)}(X_1,X') \\ &- g_<^{(0)}(X,X_1)U(X_1)g_{\tilde{T}}^{(0)}(X_1,X') \Big] \end{aligned} \tag{4.3.3}$$

可以从式 (4.3.3) 最后一项看出, 时间段 C_- 上的相互作用将贡献一个 -1 因子. 类似地, 也可对时序格林函数得出

$$\begin{aligned} g_T(X,X') =& g_T^{(0)}(X,X') + \int \mathrm{d}^3x_1 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t_1 \Big[g_T^{(0)}(X,X_1)U(X_1)g_T^{(0)}(X_1,X') \\ &- g_<^{(0)}(x,x_1)U(x_1)g_>^{(0)}(x_1,x') \Big] \end{aligned} \tag{4.3.4}$$

如此等.

像零温时序格林函数和松原函数的图形微扰论那样, 也可引入自能, 并将 COGF 写成如下回路**Dyson 方程**形式 (参见式 (4.4.4)):

$$g(X,X') = g^{(0)}(X,X') + \int \mathrm{d}^3x_1\mathrm{d}^3x_2 \int_C \mathrm{d}t_1\mathrm{d}t_2 g^{(0)}(X,X_1)\varSigma(X_1,X_2)g(X_2,X') \tag{4.3.5}$$

其中, $\varSigma$ 代表所有不可约自能图的和.

(2) 除了上面所述方法之外, 另一种直接得到 COGF 费曼图的方法是想办法将对时间回路 C 的积分改变成从 $-\infty$ 到 ∞ 的积分. 注意到: $S_c = S_{c_-}(-\infty,\infty)S_{c_+}(\infty,-\infty) = S_{c_-}^+(\infty,-\infty)S_{c_+}(\infty,-\infty)$. 我们可以分别将 $S_{c_-}^+(\infty,-\infty)$ 和 $S_{c_+}(\infty,-\infty)$ 展开成级数代入式 (4.2.8) 并运用 Wick 定理, 这样会比普通图解法多出一些涉及包含 $S_{c_-}^+$ 中的算符的收缩的项, 并且相应费曼规则应遵守如下原则: ① 在 $S_{c_-}^+$ 中的相互作用算符是 $+\mathrm{i}\hat{H}_t'(t)$, 而在 S_{c_+} 中的是 $-\mathrm{i}\hat{H}_t'(t)$; ② $S_{c_-}^+$

中的场算符 (标记为 $\hat{\varPsi}_{\mathrm{I}}^{(1)}(x)$) 应排在 S_{c_+} 中的场算符 (标记为 $\hat{\varPsi}_{\mathrm{I}}^{(2)}(x)$) 的左边; ③ $S_{c_-}^{+}$ 中的算符是反编时的, S_{c_+} 中的算符是编时的, 即

$$S_{c_+}=T\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t\hat{H}_t'(t)},\quad S_{c_-}=\tilde{T}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t\hat{H}_t'(t)}$$

为了方便实施上述原则, 在费曼图的每条线的端点上要用 (+) 或 (−) 标出以表明时间是在 C_+ 或 C_- 段上. 例如, 外势的图形及其贡献为

$+$ X　$-\mathrm{i}U(X)$　　　　$-$ X　$\mathrm{i}U(X)$

自由格林函数线的图形为

$\mathrm{i}g_0^{++}(X,X')$: $+$ X ← X' $+$　　　　$\mathrm{i}g_0^{+-}(X,X')$: $+$ X ← X' $-$

$\mathrm{i}g_0^{-+}(X,X')$: $-$ X ← X' $+$　　　　$\mathrm{i}g_0^{--}(X,X')$: $-$ X ← X' $-$

按标准符号, 上图中的格林函数分别为: $g_T^{(0)},g_<^{(0)},g_>^{(0)},g_{\tilde{T}}^{(0)}$.

例 2　以例 1 中的时序格林函数作为例子给出其一阶图如图 4.3.1 所示. 在计入零阶近似后, 根据时间标号, 并对顶角的变量积分可得到时序格林函数的一阶表达式为 (取 $X=x=(\underline{x},t)$ 的情形)

$$\begin{aligned}\mathrm{i}g^{++}(x,x')=&\mathrm{i}g_0^{++}(x,x')+\int\mathrm{d}^3x_1\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t_1\Big\{\mathrm{i}g_0^{++}(x,x_1)\big[-\mathrm{i}U(x_1)\big]\mathrm{i}g_0^{++}(x_1,x')\\&+\mathrm{i}g_0^{+-}(x,x_1)[\mathrm{i}U(x_1)]\mathrm{i}g_0^{-+}(x_1,x')\Big\}\end{aligned}\tag{4.3.6}$$

此即

$$\begin{aligned}g_T(x,x')=&g_T^{(0)}(x,x')+\int\mathrm{d}^3x_1\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t_1\Big[g_T^{(0)}(x,x_1)U(x_1)g_T^{(0)}(x_1,x')\\&-g_<^{(0)}(x,x_1)U(x_1)g_>^{(0)}(x_1,x')\Big]\end{aligned}\tag{4.3.7}$$

它与式 (4.3.4) 相同.

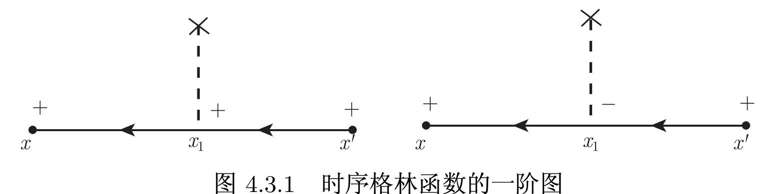
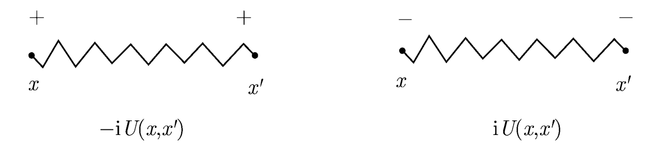


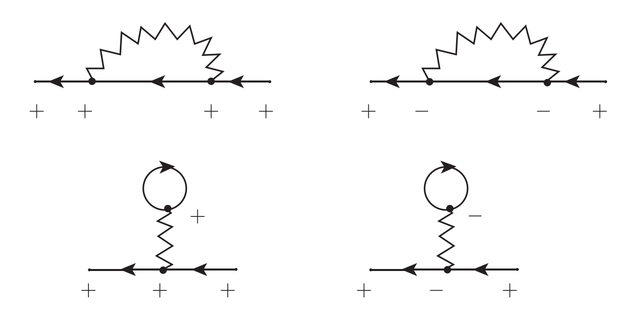
图 4.3.1　时序格林函数的一阶图

例 3 有两体相互作用的非相对论性多粒子体系.

由于此时的两体相互作用是瞬时相互作用, 故费曼图中的相互作用线 (波浪线) 两端的时间必属于同一时间段, 只能同时标记相同的符号 “+” 或 “−”:



这样, 它的时序格林函数的一阶修正项所对应的一阶图中的时间应标记为 (其中为简单起见, 我们略去了空间坐标的标记)



从以上各例可以看出一条重要规则: 将零温时序格林函数或松原函数的费曼图的所有端点以各种允许的方式标上 “+” 或 “−”, 就能得到所需要的 COGF 的费曼图.

(3) 由上述将回路 C 的积分转变成从 $-\infty$ 到 ∞ 积分的方法所给出的结果与由所谓的 Langreth 定理所直接给出的结果相同, 它们是等价的. 建立该定理的基本方法是将回路 C 进行适当的变形. 设我们要计算如下的量:

$$C(t,t') = \int_C \mathrm{d}t_1 A(t,t_1)B(t_1,t') \tag{4.3.8}$$

这里由于我们只关心时间变量, 所以略去空间坐标和自旋. 它的紧致形式可写成矩阵形式: $\boldsymbol{C} = \boldsymbol{AB}$. 为了具体起见, 设 t 位于回路段 C_+, t' 位于 C_-, 这时 $C(t,t')$ 实际上是一个小于函数. 我们将回路 C 变形成如图 4.3.2 所示, 它由 C_1 和 C_2 组成.

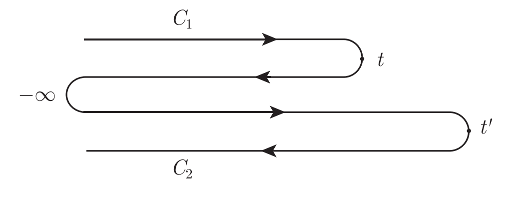


图 4.3.2 变形的 C 回路

这样式 (4.3.8) 变成

$$C_<(t,t') = \int_{C_1} \mathrm{d}t_1 A(t,t_1)B_<(t_1,t') + \int_{C_2} \mathrm{d}t_1 A_<(t,t_1)B(t_1,t') \tag{4.3.9}$$

其中, 出现在右边第一项 B 下的 $<$ 符号是由于在回路序意义上, t_1 总是先于 t', 类似也应有第二项 A 下的 $<$ 符号. 又因

$$\begin{aligned}\int_{C_1} \mathrm{d}t_1 A(t,t_1)B_<(t_1,t') &= \int_{-\infty}^{t} \mathrm{d}t_1 A_>(t,t_1)B_<(t_1,t') + \int_{t}^{-\infty} \mathrm{d}t_1 A_<(t,t_1)B_<(t_1,t') \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t_1 \theta(t-t_1)A_>(t,t_1)B_<(t_1,t') \\ &\quad - \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t_1 \theta(t-t_1)A_<(t,t_1)B_<(t_1,t') \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t_1 A_r(t,t_1)B_<(t_1,t')\end{aligned}$$

类似处理式 (4.3.9) 右边第二项积分. 这样得到**Langreth 定理**所给结果:

$$C_<(t,t') = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t_1 \left[A_\mathrm{r}(t,t_1)B_<(t_1,t') + A_<(t,t_1)B_\mathrm{a}(t_1,t')\right] \tag{4.3.10}$$

写成紧致形式为

$$C_< = A_\mathrm{r}B_< + A_<B_\mathrm{a} \tag{4.3.11}$$

同理可得

$$C_> = A_\mathrm{r}B_> + A_>B_\mathrm{a} \tag{4.3.12}$$

以及

$$C_\mathrm{r} = A_\mathrm{r}B_\mathrm{r}, \quad C_\mathrm{a} = A_\mathrm{a}B_\mathrm{a} \tag{4.3.13}$$

将式 (4.3.10) 应用到例 1, 并利用式 (4.2.15) 就可得到式 (4.3.3) 同样的结果.

对于回路积分中的量 $D = ABC$, 类似有

$$D_< = A_\mathrm{r}B_\mathrm{r}C_< + A_\mathrm{r}B_<C_\mathrm{a} + A_<B_\mathrm{a}C_\mathrm{a} \tag{4.3.14}$$

$$D_\mathrm{r} = A_\mathrm{r}B_\mathrm{r}C_\mathrm{r} \tag{4.3.15}$$

$D_>$ 也有和 $D_<$ 相似的式子, 仅需要将所有符号 $<$ 用符号 $>$ 代替.

(4) 微扰展开的基本组元之一是自由格林函数 $g^{(0)}$, 因此我们来研究它们的运动方程和具体表达式. 对于非相对论性的自由粒子体系, $g^{(0)++}$ 满足运动方程

$$\hat{g}_1^{(0)-1} g^{(0)++}(X,X') = \delta(X-X') \tag{4.3.16}$$

其中, $\hat{g}_1^{(0)-1}$ 是微分算符:

$$\hat{g}_1^{(0)-1} \equiv \mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\boldsymbol{\nabla}^2}{2m} + \mu \tag{4.3.17}$$

$\hat{g}_1^{(0)-1}$ 中的下标 1 表示求导时应对 $g^{(0)++}$ 中的第一个变量求导. 反过来, 若下标是 2, 则应对第二个变量求导. 式 (4.3.16) 的证明如下:

$$\begin{aligned}\mathrm{i}g^{(0)++}(X,X') &= \langle T\hat{\Psi}(X)\hat{\Psi}^+(X')\rangle \\ &= \left\langle \left[\theta(t-t')\hat{\Psi}(X)\hat{\Psi}^+(X') \pm \theta(t'-t)\hat{\Psi}^+(X')\hat{\Psi}(X)\right]\right\rangle\end{aligned}$$

故

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}g^{(0)++}(X,X') =& \left\langle \left\{ \delta(t-t')\hat{\Psi}(X)\hat{\Psi}^+(X') + \theta(t-t')\frac{\partial\hat{\Psi}(X)}{\partial t}\hat{\Psi}^+(X') \right.\right. \\ & \left.\left. \pm \left[-\delta(t'-t)\hat{\Psi}^+(X')\hat{\Psi}(X) + \theta(t'-t)\hat{\Psi}^+(X')\frac{\partial\hat{\Psi}(X)}{\partial t} \right] \right\}\right\rangle\end{aligned}$$

再利用算符 S-方程 $\mathrm{i}\dfrac{\partial\hat{\Psi}(X)}{\partial t} = \hat{H}^{\mu}\hat{\Psi}(X) = \left(-\dfrac{\boldsymbol{\nabla}^2}{2m} - \mu\right)\hat{\Psi}(X)$ 以及场算符所满足的正则等时量子化关系, 代入上式, 得

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}g^{(0)++}(X,X') = \delta(X-X') + \mathrm{i}\left(\frac{\boldsymbol{\nabla}^2}{2m} + \mu\right)\mathrm{i}g^{(0)++}(X,X')$$

此即式 (4.3.16).

有关格林函数 (或关联函数) 的运动方程需进一步讨论可参见第五章第六节. 式 (4.3.16) 右端的 δ 函数源于 $g^{(0)++}(X,X')$ 在 $t=t'$ 时的不连续性. 由式 (4.2.11) 不难看出, $g^{(0)--}(X,X')$ 在 $t=t'$ 时也不连续, 并有一个相反的符号, 所以有

$$\hat{g}_1^{(0)-1}g^{(0)--}(X,X') = -\delta(X-X') \tag{4.3.18}$$

$$\left(\hat{g}_2^{(0)-1}\right)^* g^{(0)--}(X,X') = \delta(X-X') \tag{4.3.18a}$$

由式 (4.2.17) 可知, $g^{(0)+-}$ 和 $g^{(0)-+}$ 在 $t=t'$ 时是连续的, 故

$$\hat{g}_1^{(0)-1}g^{(0)+-}(X,X') = 0, \quad \hat{g}_1^{(0)-1}g^{(0)-+}(X,X') = 0 \tag{4.3.19}$$

进而从式 (4.2.15) 看出, $g_{\mathrm{r}}^{(0)}$, $g_{\mathrm{a}}^{(0)}$ 和 $g^{(0)++}$ 有着同样的不连续性, 故

$$\hat{g}_1^{(0)-1}g_{\mathrm{r}}^{(0)}(X,X') = \delta(X-X'), \quad \hat{g}_1^{(0)-1}g_{\mathrm{a}}^{(0)}(X,X') = \delta(X-X') \tag{4.3.20}$$

自由粒子的场算符在海森伯绘景及相互作用绘景中相同, 均为

$$\hat{\Psi}_{\mathrm{I}}(\underline{x},t) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\underline{k}}\hat{c}_{\underline{k}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}[(\varepsilon_k-\mu)t-\underline{k}\cdot\underline{x}]} \tag{4.3.21}$$

代入 $g_<^{(0)}$ 定义式中, 并利用自由粒子情形下的公式

$$\langle \hat{c}_{\underline{k}}^+ \hat{c}_{\underline{k}} \rangle = n_{\underline{k}}^{(0)}, \quad \langle \hat{c}_{\underline{k}} \hat{c}_{\underline{k}}^+ \rangle = 1 \pm n_{\underline{k}}^{(0)} \tag{4.3.22}$$

其中, $n_{\underline{k}}^{(0)}$ 是自由粒子的动量分布. 由此可得

$$g_<^{(0)}(\underline{x}, t) = \mp \mathrm{i} \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} n_{\underline{k}}^{(0)} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}[(\varepsilon_{\underline{k}} - \mu)t - \underline{k} \cdot \underline{x}]} \tag{4.3.23}$$

这里已取了 $g_<^{(0)}(\underline{x}, t) \equiv g_<^{(0)}(\underline{x}, t; \underline{x}' = 0, t' = 0)$, 式 (4.3.23) 又可以写成四维形式:

$$g_<^{(0)}(\underline{x}, t) = \mp 2\pi \mathrm{i} \int \frac{\mathrm{d}^4 k}{(2\pi)^4} n_{\underline{k}}^{(0)} \mathrm{e}^{-\mathrm{i} k \cdot x} \delta(\omega - \varepsilon_{\underline{k}} + \mu) \tag{4.3.24}$$

其傅里叶分量为

$$\begin{aligned} g_<^{(0)}(\underline{k}, t) &= \mp \mathrm{i} n_{\underline{k}}^{(0)} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\varepsilon_{\underline{k}} - \mu)t} \\ g_<^{(0)}(\underline{k}, \omega) &= \mp 2\pi \mathrm{i} n_{\underline{k}}^{(0)} \delta(\omega - \varepsilon_{\underline{k}} + \mu) \end{aligned} \tag{4.3.25}$$

同样可得

$$g_>^{(0)}(\underline{k}, \omega) = -2\pi \mathrm{i}(1 \pm n_{\underline{k}}^{(0)}) \delta(\omega - \varepsilon_{\underline{k}} + \mu) \tag{4.3.26}$$

为了计算 $g_\mathrm{r}^{(0)}$, 最方便的是直接从其运动方程出发:

$$\left(\mathrm{i} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\boldsymbol{\nabla}^2}{2m} + \mu \right) g_\mathrm{r}^{(0)}(\underline{x}, t) = \delta(t) \delta(\underline{x})$$

利用傅里叶变换, 并且注意到推迟格林函数是上半平面的解析函数, 可得

$$g_\mathrm{r}^{(0)}(\underline{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\underline{k}} + \mu + \mathrm{i}0^+} \tag{4.3.27}$$

由其复共轭可得超前格林函数. 再利用式 (4.2.15) 可得时序格林函数

$$\begin{aligned} g_T^{(0)}(\underline{k}, \omega) &= \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\underline{k}} + \mu + \mathrm{i}0^+} \mp 2\pi \mathrm{i} n_{\underline{k}}^{(0)} \delta(\omega - \varepsilon_{\underline{k}} + \mu) \\ &= P \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\underline{k}} + \mu} + \mathrm{i}\pi(\mp 2 n_{\underline{k}}^{(0)} - 1) \delta(\omega - \varepsilon_{\underline{k}} + \mu) \end{aligned} \tag{4.3.28}$$

对于平衡体系, $n_{\underline{k}}^{(0)}$(它与温度或逆温 β 有关) 可以取为费米分布或玻色分布. 注意式 (4.3.27) 表明 $g_\mathrm{r}^{(0)}$(以及 $g_\mathrm{a}^{(0)}$) 并不依赖于 $n_{\underline{k}}^{(0)}$, 与体系的状态性质无关.

在温度 $T = 0$ 时, 费米分布将是 $n_{\underline{k}}^{(0)} = \theta(k_\mathrm{F} - |\underline{k}|)$. 因此, 对于零温费米体系, 由式 (4.3.28) 可得

$$G_T^{(0)}(\underline{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\underline{k}} + \mu + \mathrm{i}0^+ \cdot \mathrm{sgn}(\varepsilon_{\underline{k}} - \mu)} \tag{4.3.29}$$

又由式 (4.3.23) 和式 (4.3.25) 知, 对于零温费米子体系:

$$G_<^{(0)}(\underline{k},\omega)=0 \quad (|\underline{k}|>k_{\mathrm{F}}); \qquad G_>^{(0)}(\underline{k},\omega)=0 \quad (|\underline{k}|<k_{\mathrm{F}}) \tag{4.3.30}$$

这使得式 (4.3.7) 中右端最后一项必为零. G_T 的高阶修正项中凡有 "−" 号顶角的图贡献都将是零, 从而 COGF 的图形技术直接导出了零温时的普通图形技术.

第四节 COGF 的 Keldysh 表述形式

利用上述方法, 可以将准确格林函数用不可约自能表示出. 仍以时序格林函数为例, 只需要画出用不可约自能表示出的准确零温时序格林函数图, 再在图形端点标记出正确的标记 "+" 或 "−", 如图 4.4.1 所示.

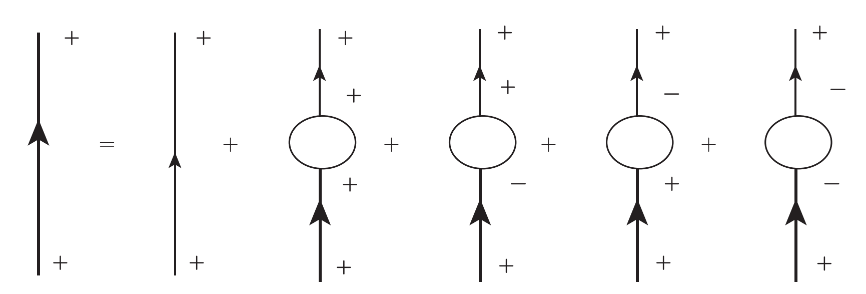


图 4.4.1 用自能表示准确时序格林函数

图 4.4.1 中, 粗线代表准确格林函数, ◯ 代表不可约自能 $\Sigma^{++},\Sigma^{+-},\Sigma^{-+},\Sigma^{++}$. (注: 将右边图形的粗线画在上边也可以.) 该图的解析表达式 (它构成了时序格林函数所满足的准确的运动方程) 为

$$\begin{aligned} g^{++}(X,X')=&g_0^{++}(X,X')+\int \mathrm{d}^4X_1\mathrm{d}^4X_2\Big[g_0^{++}(X,X_1)\Sigma^{++}(X_1,X_2)g^{++}(X_2,X') \\ &+g_0^{++}(X,X_1)\Sigma^{+-}(X_1,X_2)g^{-+}(X_2,X') \\ &+g_0^{+-}(X,X_1)\Sigma^{-+}(X_1,X_2)g^{++}(X_2,X') \\ &+g_0^{+-}(X,X_1)\Sigma^{--}(X_1,X_2)g^{-+}(X_2,X')\Big] \end{aligned} \tag{4.4.1}$$

类似可导出其他三个 COGF 满足的方程. 这些方程均可用矩阵表示. 定义矩阵

$$\boldsymbol{g}=\begin{pmatrix} g^{++} & g^{+-} \\ g^{-+} & g^{--} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} g_T & g^< \\ g^> & g_{\tilde{T}} \end{pmatrix} \tag{4.4.2}$$

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \Sigma^{++} & \Sigma^{+-} \\ \Sigma^{-+} & \Sigma^{--} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Sigma_T & \Sigma^{<} \\ \Sigma^{>} & \Sigma_{\tilde{T}} \end{pmatrix} \tag{4.4.3}$$

则式 (4.4.1) 以及其余三个方程均可写成如下矩阵**Dyson 方程**形式:

$$\boldsymbol{g}(X,X') = \boldsymbol{g}^{(0)}(X,X') + \int \mathrm{d}^4X_1\mathrm{d}^4X_2\boldsymbol{g}^{(0)}(X,X_1)\boldsymbol{\Sigma}(X_1,X_2)\boldsymbol{g}(X_2,X') \tag{4.4.4}$$

注意: 尽管式 (4.4.4) 与式 (4.3.5) 形式相同, 但有重要的不同. ① 式 (4.4.4) 中时间的积分总是从 $-\infty$ 到 ∞, 而式 (4.3.5) 时间的积分是按回路序来进行的; ② 式 (4.4.4) 中的格林函数和自能都是矩阵, 而式 (4.3.5) 中的格林函数却是四种格林函数中的任何一个.

如果采用广义爱因斯坦求和规约, 则矩阵**Dyson 方程**(4.4.4) 可写成紧致形式:

$$\boldsymbol{g} = \boldsymbol{g}^{(0)} + \boldsymbol{g}^{(0)}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{g} \tag{4.4.5}$$

矩阵 Dyson 方程是积分方程, 我们也可以给出它的微分形式. 由于 $\boldsymbol{g}^{(0)}$ 的运动方程可写成如下形式 (参见式 (4.3.16), 式 (4.3.18) 和式 (4.3.19)):

$$\hat{g}_1^{(0)-1}\boldsymbol{g}^{(0)}(X,X') = \boldsymbol{\sigma}_z\delta(X-X') \tag{4.4.6}$$

其中

$$\boldsymbol{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{4.4.7}$$

故式 (4.4.4) 可写成微分–积分方程:

$$\hat{g}_1^{(0)-1}\boldsymbol{g}(X,X') = \boldsymbol{\sigma}_z\delta(X-X') + \int \mathrm{d}^4X_1\boldsymbol{\sigma}_z\boldsymbol{\Sigma}(X,X_1)\boldsymbol{g}(X_1,X') \tag{4.4.8}$$

如果将 Dyson 方程图形中的粗线画在上边, 则可得

$$\hat{g}_2^{(0)-1*}\boldsymbol{g}(X,X') = \boldsymbol{\sigma}_z\delta(X-X') + \int \mathrm{d}^4X_1\boldsymbol{g}(X,X_1)\boldsymbol{\Sigma}(X_1,X')\boldsymbol{\sigma}_z \tag{4.4.9}$$

写成紧致形式分别为

$$\hat{g}_1^{(0)-1}\boldsymbol{g} = \boldsymbol{\sigma}_z + \boldsymbol{\sigma}_z\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{g} \tag{4.4.10}$$

$$\hat{g}_2^{(0)-1*}\boldsymbol{g} = \boldsymbol{\sigma}_z + \boldsymbol{g}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{\sigma}_z \tag{4.4.11}$$

矩阵方程 (4.4.8) 或 (4.4.9) 构成了准确格林函数的完整方程组. 其中的自能也可用我们所述的图形法则, 例如, 对于常见的二体相互作用, $-\mathrm{i}\Sigma_{<}$ 的自能图如图 4.4.2 所示.

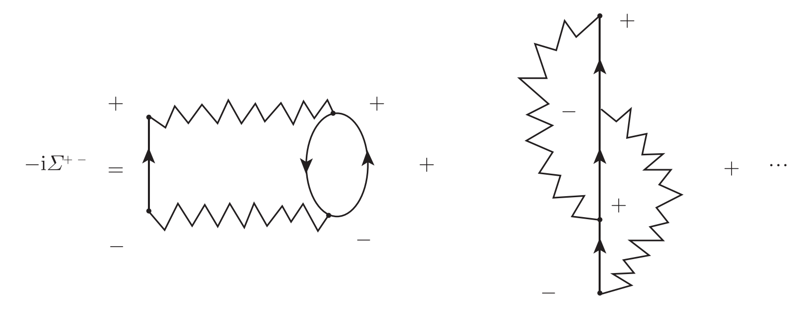


图 4.4.2　自能 $\Sigma_<$

值得注意的是, 式 (4.4.2) 及式 (4.4.3) 的矩阵的行和列的上述定义并不是唯一的. 正因为如此, 引入如下一种坐标变换 (常称为**Keldysh**空间中的旋转) 是有用的, 因为可让这个旋转去消除矩阵元的某些简并度、分离出推迟和超前格林函数并简化矩阵本身. 其幺正变换矩阵是

$$\boldsymbol{L}=\boldsymbol{L}^{-1}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix} \tag{4.4.12}$$

则易得到矩阵格林函数的 Keldysh 形式, $\hat{\boldsymbol{g}}\equiv\boldsymbol{L}^{-1}\boldsymbol{g}\boldsymbol{L}$, 从而

$$\hat{\boldsymbol{g}}=\begin{pmatrix}g_{\mathrm{K}} & g_{\mathrm{r}}\\ g_{\mathrm{a}} & 0\end{pmatrix} \tag{4.4.13}$$

其中

$$g_{\mathrm{K}}\equiv g_<+g_> \tag{4.4.14}$$

矩阵元 g_{K} 常称为**Keldysh 格林函数**. 若对 $\boldsymbol{g}^{(0)}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}$ 也作同样的幺正变换, 则矩阵 Dyson 方程仍保持与式 (4.4.4) 和式 (4.4.5) 同样的形式:

$$\hat{\boldsymbol{g}}=\hat{\boldsymbol{g}}^{(0)}+\hat{\boldsymbol{g}}^{(0)}\hat{\boldsymbol{\Sigma}}\hat{\boldsymbol{g}} \tag{4.4.15}$$

其中, 矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 变成

$$\hat{\boldsymbol{\Sigma}}\equiv\boldsymbol{L}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{L}=\begin{pmatrix}0 & \Sigma_{\mathrm{a}}\\ \Sigma_{\mathrm{r}} & \Sigma_{\mathrm{K}}\end{pmatrix} \tag{4.4.16}$$

且

$$\begin{cases}\Sigma_{\mathrm{r}}=\Sigma_t+\Sigma_<\\ \Sigma_{\mathrm{a}}=\Sigma_t+\Sigma_>\\ \Sigma_{\mathrm{K}}=\Sigma_t+\Sigma_{\tilde{t}}=-(\Sigma_>+\Sigma_<)\end{cases} \tag{4.4.17}$$

这里我们利用了公式 $\Sigma_t+\Sigma_{\tilde{t}}=-(\Sigma_>+\Sigma_<)$, 它的证明可以利用公式 $g_T+g_{\tilde{T}}$

$=g_<+g_>$, 从而有方程 $\hat{g}_1^{(0)-1}(g_T+g_{\tilde{T}}-g_<-g_>)=0$, 然后将括号内各格林函数的运动方程 (利用式 (4.4.10)) 代入即可得证.

将矩阵 Dyson 方程 (4.4.15) 展开, 可得到

$$g_{\mathrm{r}}=g_{\mathrm{r}}^{(0)}(1+\Sigma_{\mathrm{r}}g_{\mathrm{r}}) \tag{4.4.18}$$

$$g_{\mathrm{a}}=g_{\mathrm{a}}^{(0)}(1+\Sigma_{\mathrm{a}}g_{\mathrm{a}}) \tag{4.4.19}$$

$$g_{\mathrm{K}}=g_{\mathrm{K}}^{(0)}(1+\Sigma_{\mathrm{a}}g_{\mathrm{a}})+g_{\mathrm{r}}^{(0)}(\Sigma_{\mathrm{K}}g_{\mathrm{a}}+\Sigma_{\mathrm{r}}g_{\mathrm{K}}) \tag{4.4.20}$$

这里由于 g_{a} 可由 g_{r} 的复共轭来得到, 所以式 (4.4.19) 不会给出新内容. 尽管式 (4.4.15) 包含 $g_{\mathrm{r}}^{(0)}$, 但由于 $g_{\mathrm{r}}^{(0)}$ 与体系状态无关, 故该方程与无相互作用 “(0) 态” 无关. 然而式 (4.4.20) 却依赖于 (0) 态. 不过我们可以通过微分算符 $\hat{g}_1^{(0)-1}$ 将它约化成与 (0) 态无关的方程. 根据式 (4.3.19) 可知, $\hat{g}_1^{(0)-1}g_{\mathrm{K}}^{(0)}=0$. 所以我们得到了方程

$$\hat{g}_1^{(0)-1}g_{\mathrm{K}}=\Sigma_{\mathrm{K}}g_{\mathrm{a}}+\Sigma_{\mathrm{r}}g_{\mathrm{K}} \tag{4.4.21}$$

积分方程 (4.4.18) 和微分–积分方程 (4.4.21) 原则上能够完整描述非平衡体系行为. 其中, 方程 (4.4.21) 可看成玻尔兹曼方程的一种推广 (与后者不同, 前者含有两个而不是一个时间变量), g_{K} 直接与粒子分布函数相联系.

计算经常采用如下两步: 首先对 $g_{\mathrm{a,r}}$ 求解 Dyson 方程, 然后用它们的结果作为式 (4.4.21) 的输入值来计算. 但也有可能会出现需要同时联立求解的复杂情形.

式 (4.4.20) 和式 (4.4.21) 是对于 $g_<, g_>$ 的和 (即 g_{K}) 而言的. 也可以给出对单独的 $g_<$(或 $g_>$) 的准确运动方程. 作为直接利用 Langreth 定理 (4.3.14) 的例子, 我们从回路 Dyson 方程得到

$$g_<=g_<^{(0)}+g_{\mathrm{r}}^{(0)}\Sigma_{\mathrm{r}}g_<+g_{\mathrm{r}}^{(0)}\Sigma_<g_{\mathrm{a}}+g_<^{(0)}\Sigma_{\mathrm{a}}g_{\mathrm{a}}$$

作一次迭代, 可得

$$g_<=(1+g_{\mathrm{r}}^{(0)}\Sigma_{\mathrm{r}})g_<^{(0)}(1+\Sigma_{\mathrm{a}}g_{\mathrm{a}})+(g_{\mathrm{r}}^{(0)}+g_{\mathrm{r}}^{(0)}\Sigma_{\mathrm{r}}g_{\mathrm{r}}^{(0)})\Sigma_<g_{\mathrm{a}}+g_{\mathrm{r}}^{(0)}\Sigma_{\mathrm{r}}g_{\mathrm{r}}^{(0)}\Sigma_{\mathrm{r}}g_<$$

由上式不难发现, 经过无穷多次的迭代后可得积分方程

$$g_<=(1+g_{\mathrm{r}}\Sigma_{\mathrm{r}})g_<^{(0)}(1+\Sigma_{\mathrm{a}}g_{\mathrm{a}})+g_{\mathrm{r}}\Sigma_<g_{\mathrm{a}} \tag{4.4.22}$$

类似地也有

$$g_>=(1+g_{\mathrm{r}}\Sigma_{\mathrm{r}})g_>^{(0)}(1+\Sigma_{\mathrm{a}}g_{\mathrm{a}})+g_{\mathrm{r}}\Sigma_>g_{\mathrm{a}} \tag{4.4.23}$$

式 (4.4.22) 和式 (4.4.20) 尽管形式上有所不同, 但它们的差别只有次要的意义.

第五节 准经典近似下的输运方程

我们期待在空间和时间上变化缓慢的情形下能从本章第四节中的输运方程来导出熟知的准经典输运方程. 这需要从“慢”的宏观变化中分离出“快”的量子变化.

我们来考虑在室温情形下稍微偏离理想气体条件的费米气体. 室温意味着 $k_{\rm B}T \simeq 30{\rm meV}$, 它和典型的费米能级同量级. 此时设满足如下准经典条件: 对所有物理量显著变化的时间间隔 τ 和空间距离 L, 满足

$$\tau\varepsilon_{\rm F} \gg 1, \quad Lp_{\rm F} \gg 1 \tag{4.5.1}$$

在准经典情形, 引入混合的坐标–动量表象是恰当的. 定义

$$X \equiv (\underline{x}, t): \qquad \underline{x} = \frac{1}{2}(\underline{x}_1 + \underline{x}_2), \qquad t = \frac{1}{2}(t_1 + t_2) \tag{4.5.2}$$

$$\varXi \equiv (\underline{\xi}, \xi^0): \qquad \underline{\xi} \equiv \underline{x}_1 - \underline{x}_2, \qquad \xi^0 \equiv t_1 - t_2 \tag{4.5.3}$$

变量 $\varXi$ 在快的微观标度上变化从而必须精确处理, 设在傅里叶变换中, 它对应于

$$P \equiv (\underline{p}, \omega) \tag{4.5.4}$$

变量 X 是宏观慢变量, 可以近似地处理. 这种快慢我们可以如下理解, 在作傅里叶变换中, 对空间坐标差的重要区域是 $|\underline{x}_1 - \underline{x}_2| \sim 1/|\underline{p}|$, 时间差的重要区域是 $|t_1 - t_2| \sim 1/\varepsilon$, 从而由式 (4.5.1) 知在这些区域, $(\underline{x}_1 + \underline{x}_2)/2$ 和 $(t_1 + t_2)/2$ 变化很小.

现在通过傅里叶变换引入坐标–动量表象中的函数 $n(\underline{x}, \underline{p}, t)$ 来代替量子输运中的密度矩阵 $\rho(\underline{x}_1, \underline{x}_2, t)$:

$$n(\underline{x}, \underline{p}, t) \equiv N\int {\rm d}^3\xi {\rm e}^{-{\rm i}\underline{p}\cdot\underline{\xi}}\rho\left(\underline{x} + \frac{1}{2}\underline{\xi}, \underline{x} - \frac{1}{2}\underline{\xi}, t\right) \tag{4.5.5}$$

其中, N 是总粒子数. 这里还利用了关系 $\underline{x}_1 = \underline{x} + \underline{\xi}/2$, $\underline{x}_2 = \underline{x} - \underline{\xi}/2$. 尽管函数 $n(\underline{x}, \underline{p}, t)$ 由于量子测不准关系而不适用于量子输运, 但在准经典输运中是合适的. 事实上我们可以分析看出 $n(\underline{x}, \underline{p}, t)$ 完全符合经典分布函数的定义. 为此任意取一个力学量算符 $A(\hat{\underline{x}}, \hat{\underline{p}}) = A(\underline{x}, -{\rm i}\boldsymbol{\nabla})$, 其中, $\hat{\underline{x}}, \hat{\underline{p}}$ 是某个粒子的坐标和动量算符. 根据密度矩阵的定义知该力学量的平均值 $\bar{A}$ 为

$$\begin{aligned}\bar{A} \equiv& \langle\hat{A}\rangle = {\rm tr}(\hat{A}\hat{\rho}) = \int {\rm d}^3x\,[A(\underline{x}_1, -{\rm i}\boldsymbol{\nabla}_1)\rho(\underline{x}_1, \underline{x}_2, t)]_{\underline{x}_1=\underline{x}_2=\underline{x}} \\ =& \int {\rm d}^3x\left[A(\underline{x}_1, -{\rm i}\boldsymbol{\nabla}_1)\frac{1}{N}\int\frac{{\rm d}^3p}{(2\pi)^3}{\rm e}^{{\rm i}\underline{p}\cdot(\underline{x}_1-\underline{x}_2)}n\left(\frac{\underline{x}_1 + \underline{x}_2}{2}, \underline{p}, t\right)\right]_{\underline{x}_1=\underline{x}_2=\underline{x}}\end{aligned} \tag{4.5.6}$$

上式最后一步利用了式 (4.5.5) 的逆傅里叶变换. 再利用条件 (4.5.1) 可知, $n(\underline{x},\underline{p},t)$ 是一个远比指数因子 $\exp\{\mathrm{i}\underline{p}\cdot\underline{x}_1\}$ 变化慢的函数, 故可将 $\boldsymbol{\nabla}_1$ 只作用于指数因子而不必考虑对 n 的作用就足够精确了. 所以

$$\bar{A}=\frac{1}{N}\int \mathrm{d}^3x\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}A(\underline{x},\underline{p})n(\underline{x},\underline{p},t) \tag{4.5.7}$$

而这也正是经典分布函数意义下的任意函数 $A(\underline{x},\underline{p})$ 的平均值.

由式 (4.4.8) 和式 (4.4.9), 有

$$\hat{g}_1^{(0)-1}\boldsymbol{g}(X_1,X_2)=\boldsymbol{\sigma}_z\delta(X_1-X_2)+\int \mathrm{d}^4X_3\boldsymbol{\sigma}_z\boldsymbol{\Sigma}(X_1,X_3)\boldsymbol{g}(X_3,X_2) \tag{4.5.8}$$

$$\left(\hat{g}_2^{(0)-1}\right)^*\boldsymbol{g}(X_1,X_2)=\boldsymbol{\sigma}_z\delta(X_1-X_2)+\int \mathrm{d}^4X_3\boldsymbol{g}(X_1,X_3)\boldsymbol{\Sigma}(X_3,X_2)\boldsymbol{\sigma}_z \tag{4.5.9}$$

故

$$\begin{aligned}\left[\left(\hat{g}_2^{(0)-1}\right)^*-\hat{g}_1^{(0)-1}\right]g^<(X_1,X_2)=-\int \mathrm{d}^4X_3\Big[&g_T(X_1,X_3)\Sigma^<(X_3,X_2)\\&+g^<(X_1,X_3)\Sigma_{\tilde{T}}(X_3,X_2)+\Sigma_T(X_1,X_3)g^<(X_3,X_2)\\&+\Sigma^<(X_1,X_3)g_{\tilde{T}}(X_3,X_2)\Big]\end{aligned} \tag{4.5.10}$$

其中

$$\begin{aligned}\left(\hat{g}_2^{(0)-1}\right)^*-\hat{g}_1^{(0)-1}&=\left(\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t_2}+\frac{\boldsymbol{\nabla}_2^2}{2m}+\mu\right)^*-\left(\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t_1}+\frac{\boldsymbol{\nabla}_1^2}{2m}+\mu\right)\\&=-\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}-\frac{1}{m}\boldsymbol{\nabla}_{\underline{x}}\cdot\boldsymbol{\nabla}_{\underline{\xi}}\end{aligned} \tag{4.5.11}$$

现在我们来建立 $n(\underline{x},\underline{p},t)$ 与 $g^<(X_1,X_2)$ 之间的联系. 首先注意到式 (4.2.17), 因而必须通过傅里叶变换将 $g^<(X_1,X_2)$ 转换到坐标–动量表象中:

$$g^<(X,P)=\int \mathrm{d}^4\Xi\mathrm{e}^{\mathrm{i}P\cdot\Xi}g^<(X+\Xi/2,X-\Xi/2) \tag{4.5.12}$$

然后将 $g^<(X,P)$ 对频率积分, 积分时取 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\xi^0}$ 中的 ξ^0 为零 (相当于取 $t_1=t_2$), 则由式 (4.2.17) 得

$$n(\underline{x},\underline{p},t)=-\mathrm{i}\int\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}g^<(\underline{x},t;\omega,\underline{p}) \tag{4.5.13}$$

所以当我们对式 (4.5.10) 的两端先作傅里叶变换 $\int \mathrm{d}^4\Xi\mathrm{e}^{\mathrm{i}P\cdot\Xi}$ 然后作积分 $\int\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}$ 后, 其左端就成为

$$\frac{\partial n}{\partial t}+\frac{\underline{p}}{m}\cdot\boldsymbol{\nabla}_{\underline{x}}n$$

这正是分布函数 $n(\underline{x},\underline{p},t)$ 所满足的输运方程左边熟知的形式, 不难期待在对式 (4.5.10) 的右端作同样的积分后, 将给出碰撞积分 $\partial n/\partial t|_{\text{coll}}$. 从而得到输运方程:

$$\frac{\partial n}{\partial t}+\frac{\underline{p}}{m}\cdot\boldsymbol{\nabla}_{\underline{x}}n=\left.\frac{\partial n}{\partial t}\right|_{\text{coll}} \tag{4.5.14}$$

在对式 (4.5.10) 的右端作积分时, 右端第一项中的 $g_T(X_1,X_3)\varSigma^<(X_3,X_2)$ 可以改写成 $g_T((X_1+X_3)/2,X_1-X_3)\varSigma^<((X_3+X_2)/2,X_3-X_2)$, 在计及准经典条件 (4.5.1) 时, $(X_1+X_3)/2$ 和 $(X_3+X_2)/2$ 是慢变量, 可近似用慢变量 $X=(X_1+X_2)/2$ 代替. 这样第一项可以用 $g_T(X,X_1-X_3)\varSigma^<(X,X_3-X_2)$ 代替. 对该项作傅里叶变换, 就可得

$$\begin{aligned}&\int\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\int\mathrm{d}^4\varXi\int\mathrm{d}^4X_3\mathrm{e}^{\mathrm{i}P\cdot\varXi}g_T(X,X_1-X_3)\varSigma^<(X,X_3-X_2)\\=&\int\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}g_T(X,P)\varSigma^<(X,P)\end{aligned} \tag{4.5.15}$$

其中, 利用了公式

$$\begin{aligned}&\int\mathrm{d}(x-y)\mathrm{d}z\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(x-y)}f(x-z)g(z-y)\\=&\int\mathrm{d}(x-z)\mathrm{d}(z-y)\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(x-z)}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(z-y)}f(x-z)g(z-y)\\=&f(k)g(k)\end{aligned}$$

式 (4.5.10) 右端的其他项同样可以类似处理. 这样可得

$$\begin{aligned}\left.\frac{\partial n}{\partial t}\right|_{\text{coll}}&=-\int\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\left[g_T\varSigma^<+g^<\varSigma_{\tilde{T}}+\varSigma_Tg^<+\varSigma^<g_{\tilde{T}}\right]\\&=-\int\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\left[(g_T+g_{\tilde{T}})\varSigma^<+(\varSigma_T+\varSigma_{\tilde{T}})g^<\right]\\&=\int\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\left(\varSigma^>g^<-g^>\varSigma^<\right)\end{aligned} \tag{4.5.16}$$

其中, 利用了公式 $\varSigma_t+\varSigma_{\tilde{t}}=-(\varSigma_>+\varSigma_<)$ 和 $g_T+g_{\tilde{T}}=g_<+g_>$.

现在将式 (4.5.16) 应用于近理想费米气体模型, 其中粒子之间的相互作用势 $V(\underline{x}_1-\underline{x}_2)$ 可以视为微扰. 在非零最低阶的近似下, 可以用式 (4.3.25) 和式 (4.3.26) 中的 $g_<^{(0)}$ 和 $g_>^{(0)}$ 分别代替式 (4.5.16) 中的 $g^<$ 和 $g^>$, 并用如下的非零最低阶自能图 (二阶自能图) 来计算 $\varSigma^<$ 和 $\varSigma^>$(图 4.5.1).

首先注意到对于准理想气体, 气体分子之间的相互作用力程较短; 其次对于量子效应比较显著的简并气体, 粒子的波长 ($\sim 1/|\underline{p}|$) 与相互作用力程比较起来大得多. 这样在 $V(\underline{p}_1-\underline{p}_2)$ 中, 可视 $\underline{p}_1-\underline{p}_2$ 为小量, 并近似地用 $\underline{p}_1-\underline{p}_2=0$ 来作为它的取值.

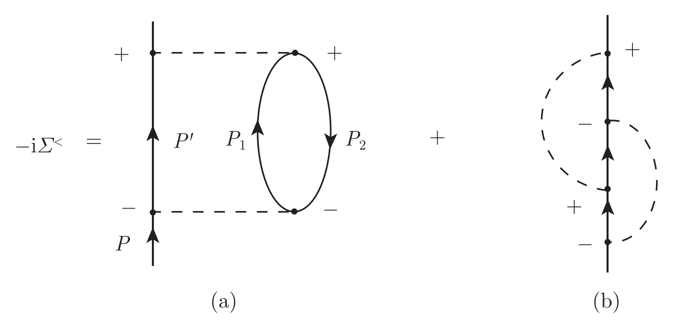


图 4.5.1　二阶自能 $\Sigma^<$ 图

因

$$V(\underline{p}_1-\underline{p}_2)=\int \mathrm{d}^3x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\underline{p}_1-\underline{p}_2)\cdot\underline{x}}V(\underline{x})$$

故可以用如下定义的 V_0 来代替 V:

$$V_0=\int \mathrm{d}^3xV(\underline{x}) \tag{4.5.17}$$

若用 V_0 来代替 V, 则图 4.5.1(a) 和图 4.5.1(b) 的自能就有如下关系: $\Sigma_{\mathrm{a}}^<=-2\Sigma_{\mathrm{b}}^<$. 其中, 符号来自于图 4.5.1(a) 中的费米子圈, 因子 2 是有圈就要对自旋求迹的缘故.

利用这个关系我们只需要写出图 4.5.1(a) 的贡献就能求两个图的总贡献.

$$-\mathrm{i}\Sigma_a^<=-2\int\frac{\mathrm{d}^4P_1}{(2\pi)^4}\frac{\mathrm{d}^4P_2}{(2\pi)^4}g^<(P')g^<(P_1)g^>(P_2)V^2(P_1-P_2) \tag{4.5.18}$$

其中, $P'=P+P_1-P_2$. 类似方法可以计算 $\Sigma^>$.

把式 (4.3.25)、式 (4.3.26) 和式 (4.5.17) 代入式 (4.5.16) 得

$$\begin{aligned}\left.\frac{\partial n}{\partial t}\right|_{\mathrm{coll}}=\int\frac{\mathrm{d}^3p_1}{(2\pi)^3}\frac{\mathrm{d}^3p_2}{(2\pi)^3}2\pi V_0\Big[&n'n_1(1-n)(1-n_2)\\&-nn_2(1-n')(1-n_1)\Big]\delta(\varepsilon+\varepsilon_2-\varepsilon'-\varepsilon_1)\end{aligned} \tag{4.5.19}$$

其中, n,n',n_1,n_2 和 $\varepsilon,\varepsilon',\varepsilon_1,\varepsilon_2$ 是分别对应于动量 $\underline{p},\underline{p}',\underline{p}_1,\underline{p}_2$ 的分布函数和粒子能量. 式 (4.5.19) 有着熟知的碰撞积分的形式, 所以我们的确能在准经典条件下, 从本章第四节中的理论体系导出准经典输运方程 (有时又称为量子玻尔兹曼方程).

我们将在第六章和第八章中给出非平衡格林函数应用的例子.

第五章　动力学关联

第一节　线性响应理论

热力学信息用前面的理论方法来提取是相当直接的: 计算巨正则势并将其对几个整体定义的系数 (如温度、均匀磁场等) 求导即可. 然而还有另外一些实验感兴趣的量, 它们涉及体系的动力学特性以及体系主要的元激发在时空结构上的信息等. 本章讨论的所谓 "关联函数" 就在这些实验数据和理论体系之间架起了一座桥梁. 事实上本节将要介绍的线性响应理论就给出了代表某些算符期待值的实验数据与这些关联函数之间的联系.

我们最感兴趣的问题之一是: 在外部扰动下体系将如何响应? 例如, 当对一个由具有磁矩的粒子构成的体系施加外磁场后, 如何求出该体系的总磁矩? 即如何求体系此时的响应函数 —— 磁化率? 等等.

考虑一个哈密顿为 $\hat{H}$(与时间无关) 的处于平衡态的相互作用多粒子体系, 它在时刻 $t_0 = 0$ 开始受到一个依赖于时间的微扰 $\hat{H}_{1\mathrm{S}}(t) \equiv \hat{H}_{1t}$(下标 S 代表是薛定谔绘景中的算符). 设微扰是非耗散的, 即熵的产生或焦耳热是可忽略的. 这只要外场变化较慢使得系综中的体系能绝热地响应而不会跃迁到其他量子态就行. 现在我们要计算体系对一个弱的外界扰动的线性响应 (即与 $\hat{H}_{1t}$ 成正比的响应). 仅当扰动很强时, 非线性响应效应才显著. 我们的目的是要用平衡态的期待值来表达这种线性响应.

令

$$\hat{H}^{\mu} \equiv \hat{H} - \mu\hat{N} \tag{5.1.1}$$

设在时刻 $t_0 = 0$ 开始施加外界微扰, 则体系的哈密顿加上外部微扰的总哈密顿为

$$\hat{H}_t^{\mathrm{total}} = \hat{H}^{\mu} + \hat{H}_{1t} \tag{5.1.2}$$

注意: 即使在薛定谔绘景下, 通常外部微扰仍显含时间, 故总哈密顿也显含时间, 为了区别于海森伯绘景下的力学量算符, 特用下标 t 来区别之.

此时力学量 A 的平均值为

$$\langle\hat{A}\rangle_t = \mathrm{tr}\left\{\hat{\rho}_t\hat{A}\right\} \tag{5.1.3}$$

此时下标 t 用来强调此时的哈密顿是 $\hat{H}_t^{\text{total}}$. 绝热响应意味着体系的内部动力学能跟随所加外部扰动的变化, 从而使得密度算符满足量子刘维尔 (Liouville) 方程:

$$\mathrm{i}\frac{\partial\hat{\rho}_t}{\partial t}=\left[\hat{H}^{\mu}+\hat{H}_{1t},\hat{\rho}_t\right] \tag{5.1.4}$$

(参见: 张先蔚. 量子统计力学. 合肥: 中国科学技术大学出版社, 1991, 式 (1.1.7))

当 $t<t_0$ 时 (先不妨设 $t_0=0$), 体系处于热平衡, 使得有

$$\hat{H}_{1t}=0$$

$$\hat{\rho}=\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}^{\mu}}/\mathrm{tr}(\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}^{\mu}}) \tag{5.1.5}$$

当 $t>t_0$ 时, 令

$$\hat{\rho}_t=\hat{\rho}+\hat{\rho}_{1t} \tag{5.1.6}$$

代入式 (5.1.4) 中, 在线性响应近似下得

$$\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}\hat{\rho}_{1t}}{\mathrm{d}t}=\left[\hat{H}^{\mu},\hat{\rho}_{1t}\right]+\left[\hat{H}_{1t},\hat{\rho}\right] \tag{5.1.7}$$

其中, 忽略了高阶项 $[\hat{H}_{1t},\hat{\rho}_{1t}]$. 在海森伯绘景下求解上式最简单, 因薛定谔绘景中的算符 B_t 在海森伯绘景中为 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}H^{\mu}t}B_t\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H^{\mu}t}$, 所以式 (2.2.7) 中取 $\hat{A}_t=\hat{\rho}_{1t}$, $\hat{H}_t=\hat{H}^{\mu}$, 则导致

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{\rho}_{1t}(t)=\mathrm{i}\left[\hat{H}^{\mu}(t),\hat{\rho}_{1t}(t)\right]+\left(\frac{\mathrm{d}\hat{\rho}_{1t}}{\mathrm{d}t}\right)(t)$$

又由式 (5.1.7) 的海森伯绘景中的表达式知

$$\left(\frac{\mathrm{d}\hat{\rho}_{1t}}{\mathrm{d}t}\right)(t)=-\mathrm{i}\left[\hat{H}^{\mu}(t),\hat{\rho}_{1t}(t)\right]-\mathrm{i}\left[\hat{H}_{1t}(t),\hat{\rho}(t)\right]$$

故有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\hat{\rho}_{1t}(t)\right)=-\mathrm{i}\left[\hat{H}_{1t}(t),\hat{\rho}\right] \tag{5.1.8}$$

其中, 利用了 $\hat{\rho}(t)\equiv\hat{\rho}$(这是因为 $\hat{\rho}$ 与 $\hat{H}^{\mu}$ 对易).

考虑到初始条件, 上式的积分给出为

$$\hat{\rho}_{1t}(t)=-\mathrm{i}\int_0^t\mathrm{d}t'\left[\hat{H}_{1t'}(t'),\hat{\rho}\right] \tag{5.1.9}$$

再回到薛定谔绘景中的 $\hat{\rho}_{1t}$ 得

$$\hat{\rho}_{1t}=-\mathrm{i}\int_0^t\mathrm{d}t'\left[\hat{H}_{1t'}(t'-t),\hat{\rho}\right] \tag{5.1.10}$$

将式 (5.1.10) 代入式 (5.1.3) 可得算符 A 的期待值

$$\langle\hat{A}\rangle_t = \langle\hat{A}\rangle - \mathrm{i}\int_0^t \mathrm{d}t'\langle[\hat{A}, \hat{H}_{1t'}(t'-t)]\rangle \tag{5.1.11}$$

其中, $\langle\cdots\rangle \equiv \mathrm{tr}(\hat{\rho}\cdots)$. 另外, 下面的时间平移不变性关系成立:

$$\langle A(t_1)B(t_2)\rangle = \langle A(t_1+t)B(t_2+t)\rangle \tag{5.1.12}$$

证明 $\langle A(t_1+t)B(t_2+t)\rangle = \mathrm{tr}\left(\hat{\rho}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}^\mu t}A(t_1)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}^\mu t}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}^\mu t}B(t_2)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}^\mu t}\right)$

$$= \mathrm{tr}\left(\hat{\rho}A(t_1)B(t_2)\right) = \langle A(t_1)B(t_2)\rangle$$

其中, 利用了迹的循环对称性以及 $\hat{\rho}$ 与 $\hat{H}^\mu$ 的对易性.

这样式 (5.1.11) 可写成

$$\langle A\rangle_t = \langle A\rangle + \int_0^\infty \mathrm{d}t'\langle\langle A(t), H_{1t'}(t')\rangle\rangle_{\mathrm{r}} \tag{5.1.13}$$

其中

$$\langle\langle\hat{A}(t), \hat{H}_{1t'}(t')\rangle\rangle_{\mathrm{r}} \equiv -\mathrm{i}\theta(t-t')\langle[\hat{A}(t), \hat{H}_{1t'}(t')]\rangle \tag{5.1.14}$$

称为推迟响应函数.

通常情形, 只要微扰时间足够长, A 的平均值将不依赖于开始施加微扰于体系的时刻, 这样式 (5.1.13) 中的积分下限可以扩展到 $-\infty$.

$$\langle A\rangle_t = \langle A\rangle + \int_{-\infty}^\infty \mathrm{d}t'\langle\langle A(t), H_{1t'}(t')\rangle\rangle_{\mathrm{r}} \tag{5.1.13a}$$

为了消除突然施加微扰于体系所出现的瞬态效应, 有时必须在被积表达式中加上因子 $\mathrm{e}^{(t'-t)0^+}$, 而让微扰绝热地施加于体系. 这样上式可进一步改写为

$$\langle\hat{A}\rangle_t = \langle\hat{A}\rangle + \int_{-\infty}^\infty \mathrm{d}t'\langle\langle\hat{A}(t), \hat{H}_{1t'}(t')\rangle\rangle_{\mathrm{r}}\mathrm{e}^{(t'-t)\cdot 0^+} \tag{5.1.15}$$

当 $\hat{H}_{1t} = -f(t)\hat{B}$ 时, 其中, $\hat{B}$ 是在薛定谔绘景中的厄米算符, 则

$$\langle\hat{A}\rangle_t = \langle\hat{A}\rangle - \int_{-\infty}^\infty \mathrm{d}t'\langle\langle\hat{A}(t), \hat{B}(t')\rangle\rangle_{\mathrm{r}}f(t')\mathrm{e}^{(t'-t)0^+} \tag{5.1.16}$$

其中, $\hat{B}(t')$ 是在海森伯绘景中.

第二节 关 联 函 数

我们定义如下虚时关联函数.

(1) **虚时关联函数**.

$$\chi^{\tau}_{AB}(\tau-\tau') \equiv \langle\langle \hat{A}(\tau); \hat{B}(\tau')\rangle\rangle_{\tau} \equiv -\langle T_{\tau}\hat{A}(\tau)\hat{B}(\tau')\rangle \tag{5.2.1}$$

其中, $\langle\cdots\rangle$ 为热力学平均. 注意松原函数是当 $\hat{A}(\tau), \hat{B}(\tau)$ 为场算符 (或粒子的消灭和产生算符) 时的特例.

进一步定义如下实时关联函数.

(2) **推迟响应函数**(又叫**动力学感应率(dynamical susceptibility)**).

$$\chi^{\mathrm{r}}_{AB}(t-t') \equiv \langle\langle \hat{A}(t); \hat{B}(t')\rangle\rangle_{\mathrm{r}} \equiv -\mathrm{i}\theta(t-t')\left\langle\left[\hat{A}(t), \hat{B}(t')\right]_{\mp}\right\rangle \tag{5.2.2}$$

其中, 对易子/反对易子 $(-/+)$ 分别应用于玻色子/费米子算符.

(3) **超前响应函数**.

$$\chi^{\mathrm{a}}_{AB}(t-t') \equiv \langle\langle \hat{A}(t); \hat{B}(t')\rangle\rangle_{\mathrm{a}} \equiv \mathrm{i}\theta(t'-t)\left\langle\left[\hat{A}(t), \hat{B}(t')\right]_{\mp}\right\rangle \tag{5.2.3}$$

(4) **实时 (因果) 响应函数**.

$$\chi^{\mathrm{c}}_{AB}(t-t') \equiv \langle\langle \hat{A}(t); \hat{B}(t')\rangle\rangle_{\mathrm{c}} \equiv -\mathrm{i}\langle T\hat{A}(t)\hat{B}(t')\rangle \tag{5.2.4}$$

有时我们也将因果响应函数 $\langle\langle \hat{A}(t); \hat{B}(t')\rangle\rangle_{\mathrm{c}}$ 简记为无角标的 $\langle\langle \hat{A}(t); \hat{B}(t')\rangle\rangle$. 当 $\hat{A}(t), \hat{B}(t)$ 为粒子的消灭和产生算符时, 若 $\langle\cdots\rangle$ 为零温下的基态平均, 这些实时单粒子关联函数就是通常意义下的零温格林函数, 分别记为 $G^{\mathrm{r}}(t-t'), G^{\mathrm{a}}(t-t'), G(t-t') \equiv G^{\mathrm{c}}(t-t')$; 若 $\langle\cdots\rangle$ 为热力学平均, 它们就是有限温度实时格林函数, 可以分别记为 $g^{\mathrm{r}}(t-t'), g^{\mathrm{a}}(t-t'), g(t-t') \equiv g^{\mathrm{c}}(t-t')$. 它们都称为推迟格林函数、超前格林函数和 (因果) 格林函数. 但在以下的讨论中, 我们设 $\hat{A}(t), \hat{B}(t)$ 是海森伯绘景中的任意算符, 即 $\hat{A}(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}^{\mu}t}\hat{A}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}^{\mu}t}$, $\hat{B}(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}^{\mu}t}\hat{B}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}^{\mu}t}$. 它们一般能用粒子的消灭和产生算符的乘积来表达. 由本章第一节线性响应理论可知, 其中的推迟响应函数是最为重要的关联函数.

对于 $\hat{B} = \hat{A}$ 时的重要情形, 我们将响应函数 χ_{AB} 简记为 χ. 例如, $\hat{A}$ 的虚时响应函数为

$$\chi(\tau-\tau') \equiv \langle\langle \hat{A}(\tau); \hat{A}(\tau')\rangle\rangle_{\tau} \equiv -\langle T_{\tau}\hat{A}(\tau)\hat{A}(\tau')\rangle \tag{5.2.1a}$$

为了了解这些关联函数之间的联系, 引入如下的 “主函数”(master function) $\chi_{AB}(z)$:

$$\chi_{AB}(z) = \frac{1}{Z}\sum_{\nu\nu' NN'}\mathrm{e}^{-\beta(E_{N\nu}-\mu N)}\left[\frac{\langle\nu N|\hat{A}|\nu' N'\rangle\langle\nu' N'|\hat{B}|\nu N\rangle}{z-E_{N'\nu'}+E_{N\nu}+\mu(N'-N)}\right.$$

$$\mp \frac{\langle \nu N|\hat{B}|\nu' N'\rangle\langle \nu' N'|\hat{A}|\nu N\rangle}{z - E_{N\nu} + E_{N'\nu'} - \mu(N'-N)}\Bigg] \tag{5.2.5}$$

其中, 等式右端中的符号含义与第三章第二节中的相应符号一样. 当 $\hat{A} = \hat{c}_{\underline{p}\alpha}, \hat{B} = \hat{c}^{+}_{\underline{p}\alpha}$ 时, $\chi_{AB}(z)$ 就能化成式 (3.5.3) 中的单粒子关联函数 $g(z, \underline{p})$.

通过对主函数 $\chi_{AB}(z)$ 与 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}z(t-t')}/(2\pi)$ 的乘积进行积分并适当选择积分路径, 可分别得到推迟、超前和因果响应函数. 可以证明有

$$\chi^{\mathrm{r}}_{AB}(t-t') = \int_{-\infty+\mathrm{i}\delta}^{\infty+\mathrm{i}\delta} \frac{\mathrm{d}z}{2\pi}\chi_{AB}(z)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}z(t-t')} \tag{5.2.6}$$

其中, $\delta \to 0$, 即路径刚好在实轴的上方, 如图 5.2.1(a) 所示.

$$\chi^{\mathrm{a}}_{AB}(t-t') = \int_{-\infty-\mathrm{i}\delta}^{\infty-\mathrm{i}\delta} \frac{\mathrm{d}z}{2\pi}\chi_{AB}(z)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}z(t-t')} \tag{5.2.7}$$

其路径刚好在实轴的下方, 如图 5.2.1(b) 所示.

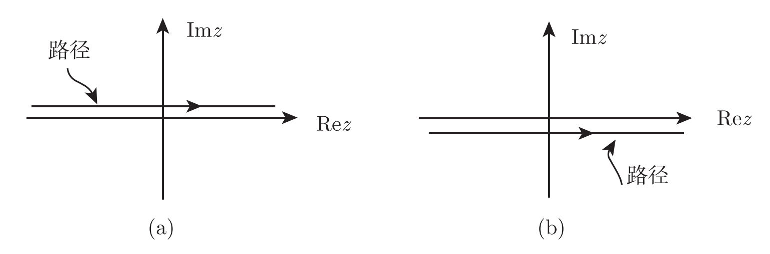


图 5.2.1　推迟、超前响应函数的路径

而对于因果响应函数, 积分路径的选取如下: 在涉及式 (5.2.5) 右边括号中第一项时, 积分应沿着刚好在实轴上方的路径, 而在涉及第二项时, 积分应沿着刚好在实轴下方的路径. 因果响应函数的积分路径的这种选取方法也可以用另一种等价的表述形式, 即把第一项中的极点移到刚好在实轴下方, 而把第二项中的极点移到刚好在实轴上方, 然后积分就沿着实轴进行:

$$\chi^{\mathrm{c}}_{AB}(t-t') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\frac{1}{Z}\sum_{\nu\nu' NN'} \mathrm{e}^{-\beta(E_{N\nu}-\mu N)}\Bigg[\frac{\langle \nu N|\hat{A}|\nu' N'\rangle\langle \nu' N'|\hat{B}|\nu N\rangle}{\omega + \mathrm{i}0^{+} - E_{N'\nu'} + E_{N\nu} + \mu(N'-N)}$$
$$\mp \frac{\langle \nu N|\hat{B}|\nu' N'\rangle\langle \nu' N'|\hat{A}|\nu N\rangle}{\omega - \mathrm{i}0^{+} - E_{N\nu} + E_{N'\nu'} - \mu(N'-N)}\Bigg]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t')} \tag{5.2.8}$$

我们仅证明式 (5.2.6), 式 (5.2.7) 和式 (5.2.8) 可类似证明.

证明　当 $t - t' < 0$ 时, 可将原积分路径与无穷大上半圆周一起构成围道, 由于围道内被积函数解析, 故围道积分为零. 由此知

$$\chi^{\mathrm{r}}_{AB}(t-t') = 0 \quad (t < t') \tag{5.2.9}$$

当 $t-t'>0$ 时, 可将原积分路径与无穷大下半圆周一起构成围道, 利用残数定理, 得

$$\begin{aligned}
\chi^{\mathrm{r}}_{AB}(t-t') =& -\frac{\mathrm{i}}{Z}\sum_{\nu\nu'NN'}\mathrm{e}^{-\beta(E_{N\nu}-\mu N)} \\
&\cdot\Big\{\langle\nu N|\hat{A}|\nu'N'\rangle\langle\nu'N'|\hat{B}|\nu N\rangle\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(t-t')[E_{N'\nu'}-E_{N\nu}+\mu(N-N')]} \\
&\mp\langle\nu N|\hat{B}|\nu'N'\rangle\langle\nu'N'|\hat{A}|\nu N\rangle\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(t-t')[E_{N\nu}-E_{N'\nu'}+\mu(N'-N)]}\Big\} \\
=& -\frac{\mathrm{i}}{Z}\sum_{\nu\nu'NN'}\mathrm{e}^{-\beta(E_{N\nu}-\mu N)} \\
&\cdot\Big\{\langle\nu N|\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_{N\nu}-\mu N)t}\hat{A}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_{N'\nu'}-\mu N')t}|\nu'N'\rangle \\
&\cdot\langle\nu'N'|\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_{N'\nu'}-\mu N')t'}\hat{B}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_{N\nu}-\mu N)t'}|\nu N\rangle \\
&\mp\langle\nu N|\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_{N\nu}-\mu N)t'}\hat{B}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_{N'\nu'}-\mu N')t'}|\nu'N'\rangle \\
&\cdot\langle\nu'N'|\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_{N'\nu'}-\mu N')t}\hat{A}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_{N\nu}-\mu N)t}|\nu N\rangle\Big\} \\
=& -\mathrm{i}\langle[\hat{A}(t),\hat{B}(t')]_{\mp}\rangle
\end{aligned}$$

故式 (5.2.6) 所给出的 $\chi^{\mathrm{r}}_{AB}(t-t')$ 正是式 (5.2.2) 所定义的推迟响应函数.

定义 $\chi^{\mathrm{r}}_{AB}(\omega)\equiv\langle\langle\hat{A};\hat{B}:\omega\rangle\rangle_{\mathrm{r}}$ 和 $\chi^{\mathrm{a}}_{AB}(\omega)\equiv\langle\langle\hat{A};\hat{B}:\omega\rangle\rangle_{\mathrm{a}}$ 为

$$\chi^{\mathrm{r}}_{AB}(t-t')\equiv\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t')}\chi^{\mathrm{r}}_{AB}(\omega) \tag{5.2.10}$$

$$\chi^{\mathrm{a}}_{AB}(t-t')\equiv\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t')}\chi^{\mathrm{a}}_{AB}(\omega) \tag{5.2.11}$$

将式 (5.2.10) 和式 (5.2.11) 与式 (5.2.6) 和式 (5.2.7) 进行比较, 知

$$\chi^{\mathrm{r}}_{AB}(\omega)=\chi_{AB}(\omega+\mathrm{i}0^{+}) \tag{5.2.12}$$

$$\chi^{\mathrm{a}}_{AB}(\omega)=\chi_{AB}(\omega-\mathrm{i}0^{+}) \tag{5.2.13}$$

第三节　涨落–耗散定理

一、涨落–耗散定理

涨落–耗散定理揭示了体系对外力的响应和体系对平衡的涨落之间的深刻联系. 在多体问题的计算中, 常会遇到各种如下类型的关联函数:

$$S^{AB}(t-t')\equiv\langle\hat{A}(t)\hat{B}(t')\rangle \tag{5.3.1}$$

它的傅里叶变换为

$$S^{AB}(t-t')=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}S^{AB}(\omega)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t')} \tag{5.3.2}$$

在 Lehmann 表示中, 有

$$\begin{aligned}S^{AB}(t-t')=&\frac{1}{Z}\sum_{\nu\nu'NN'}\mathrm{e}^{-\beta(E_{N\nu}-\mu N)}\langle\nu N|\hat{A}(t)|\nu'N'\rangle\langle\nu'N'|\hat{B}(t')|\nu N\rangle\\=&\frac{1}{Z}\sum_{\nu\nu'NN'}\mathrm{e}^{-\beta(E_{N\nu}-\mu N)}\langle\nu N|\hat{A}|\nu'N'\rangle\langle\nu'N'|\hat{B}|\nu N\rangle\\&\cdot\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(t-t')\left[E_{N'\nu'}-E_{N\nu}+\mu(N-N')\right]}\end{aligned} \tag{5.3.3}$$

其傅里叶分量为

$$\begin{aligned}S^{AB}(\omega)=&\frac{2\pi}{Z}\sum_{\nu\nu'NN'}\mathrm{e}^{-\beta(E_{N\nu}-\mu N)}\langle\nu N|\hat{A}|\nu'N'\rangle\langle\nu'N'|\hat{B}|\nu N\rangle\\&\cdot\delta(\omega+E_{N\nu}-E_{N'\nu'}+\mu(N'-N))\end{aligned} \tag{5.3.4}$$

可以证明有如下重要关系:

$$S^{AB}(\omega)=\mathrm{i}\frac{\chi_{AB}(\omega+\mathrm{i}0^+)-\chi_{AB}(\omega-\mathrm{i}0^+)}{1\mp\mathrm{e}^{-\beta\omega}} \tag{5.3.5}$$

证明　利用等式

$$\delta(x)=\frac{-1}{2\pi\mathrm{i}}\left(\frac{1}{x+\mathrm{i}0^+}-\frac{1}{x-\mathrm{i}0^+}\right) \tag{5.3.6}$$

以及式 (5.2.5), 知

$$\begin{aligned}&\chi_{AB}(\omega+\mathrm{i}0^+)-\chi_{AB}(\omega-\mathrm{i}0^+)\\=&\frac{-2\pi\mathrm{i}}{Z}\sum_{\nu\nu'NN'}\mathrm{e}^{-\beta(E_{N\nu}-\mu N)}\\&\cdot\Big[\langle\nu N|\hat{A}|\nu'N'\rangle\langle\nu'N'|\hat{B}|\nu N\rangle\delta(\omega-E_{N'\nu'}+E_{N\nu}+\mu(N'-N))\\&\mp\langle\nu N|\hat{B}|\nu'N'\rangle\langle\nu'N'|\hat{A}|\nu N\rangle\delta(\omega-E_{N\nu}+E_{N'\nu'}-\mu(N'-N))\Big]\end{aligned} \tag{5.3.7}$$

交换等式右端第二项中的 N,N' 和 ν,ν', 得

$$\begin{aligned}\chi_{AB}(\omega+\mathrm{i}0^+)-\chi_{AB}(\omega-\mathrm{i}0^+)=&\frac{-2\pi\mathrm{i}}{Z}\sum_{\nu\nu'NN'}\langle\nu N|\hat{A}|\nu'N'\rangle\langle\nu'N'|\hat{B}|\nu N\rangle\\&\cdot\delta(\omega-E_{N'\nu'}+E_{N\nu}+\mu(N'-N))\\&\left[\mathrm{e}^{-\beta(E_{N\nu}-\mu N)}\mp\mathrm{e}^{-\beta(E_{N'\nu'}-\mu N')}\right]\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{-2\pi \mathrm{i}}{Z} \sum_{\nu\nu' NN'} \langle \nu N|\hat{A}|\nu' N'\rangle \langle \nu' N'|\hat{B}|\nu N\rangle \\
&\quad \cdot \delta(\omega - E_{N'\nu'} + E_{N\nu} + \mu(N'-N)) \\
&\quad \cdot \mathrm{e}^{-\beta(E_{N\nu}-\mu N)} \left(1 \mp \mathrm{e}^{-\beta\omega}\right)
\end{aligned} \tag{5.3.8}
$$

最后一步利用了 δ 函数的性质. 比较式 (5.3.4) 和式 (5.3.8) 得出式 (5.3.5).

式 (5.3.5) 常被称为涨落–耗散定理. 为了更清楚地看出这一点, 考虑被观测的力学量算符和驱动力算符相同时的情形: $\hat{A}(t) = \hat{B}(t)$. 并设平衡时的期待值为零, 即 $\langle \hat{A}(t)\rangle = 0$, 则 $S^{AB}(t-t')$ 可以写成

$$
S^{AB}(t-t') = \left\langle \left[\hat{A}(t) - \langle \hat{A}(t)\rangle\right] \left[\hat{A}(t') - \langle \hat{A}(t')\rangle\right] \right\rangle \tag{5.3.9}
$$

它 (从而 $S^{AB}(\omega)$) 清楚地描述了算符 $\hat{A}$ 的量子涨落行为. 另外, 有

$$
\chi(\omega + \mathrm{i}0^+) - \chi(\omega - \mathrm{i}0^+) = 2\mathrm{i}\mathrm{Im}\chi(\omega + \mathrm{i}0^+) \tag{5.3.10}
$$

其虚部具有耗散性质, 例如, 考虑体系的电导, 此时 $\hat{A}(t) = \hat{\underline{j}}(t)$(电流密度), 则电荷的动能将被耗散于体系的内部激发.

类似地可以证明

$$
\tilde{S}^{AB}(\omega) \equiv \mathrm{e}^{-\beta\omega} S^{AB}(\omega) = \mathrm{i}\frac{\chi_{AB}(\omega + \mathrm{i}0^+) - \chi_{AB}(\omega - \mathrm{i}0^+)}{\mathrm{e}^{\beta\omega} \mp 1} \tag{5.3.11}
$$

是关联函数 $\langle \hat{B}(t')\hat{A}(t)\rangle$ 的傅里叶变换, 即

$$
\langle \hat{B}(t')\hat{A}(t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t')} \tilde{S}^{AB}(\omega) \tag{5.3.12}
$$

作为式 (5.3.5) 的一个应用例子, 我们考虑当 $\hat{A}(t) = \hat{c}_{\underline{p}}(t), \hat{B}(0) = \hat{c}^+_{\underline{p}}(0)$ 时的情形, 并设体系是一个与自旋无关的两两相互作用的电子体系, 进而建立起该体系的能量期待值和响应函数的关系.

由海森伯运动方程

$$
\begin{aligned}
\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}\hat{c}_{\underline{p}}(t)}{\mathrm{d}t} &= \left[\hat{c}_{\underline{p}}(t), \hat{H}(t) - \mu\hat{N}\right] \\
&= \left(\frac{\underline{p}^2}{2m} - \mu\right)\hat{c}_{\underline{p}}(t) + \sum_{\underline{p}_1, \underline{q}} V(\underline{q})\hat{c}^+_{\underline{p}_1}(t)\hat{c}_{\underline{p}_1+\underline{q}}(t)\hat{c}_{\underline{p}-\underline{q}}(t)
\end{aligned} \tag{5.3.13}
$$

故有

$$
\lim_{t\to 0} \mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \hat{c}^+_{\underline{p}}(0)\hat{c}_{\underline{p}}(t)\rangle = \left(\frac{\underline{p}^2}{2m} - \mu\right)\langle \hat{c}^+_{\underline{p}}\hat{c}_{\underline{p}}\rangle + \sum_{\underline{p}_1, \underline{q}} V(\underline{q})\langle \hat{c}^+_{\underline{p}}\hat{c}^+_{\underline{p}_1}\hat{c}_{\underline{p}_1+\underline{q}}\hat{c}_{\underline{p}-\underline{q}}\rangle \tag{5.3.14}
$$

这样有

$$\begin{aligned}\langle\hat{H}\rangle &= \sum_{\underline{p}}\frac{\underline{p}^2}{2m}\langle\hat{c}_{\underline{p}}^+\hat{c}_{\underline{p}}\rangle+\frac{1}{2}\sum_{\underline{p}_1,\underline{q}}V(\underline{q})\langle\hat{c}_{\underline{p}}^+\hat{c}_{\underline{p}_1}^+\hat{c}_{\underline{p}_1+\underline{q}}\hat{c}_{\underline{p}-\underline{q}}\rangle\\ &=\lim_{t\to 0}\sum_{\underline{p}}\left[\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{c}_{\underline{p}}^+(0)\hat{c}_{\underline{p}}(t)\rangle+\left(\frac{\underline{p}^2}{2m}+\mu\right)\langle\hat{c}_{\underline{p}}^+(0)\hat{c}_{\underline{p}}(t)\rangle\right]\end{aligned}$$

若 $\tilde{S}(\underline{p},\omega)$ 是 $\langle\hat{c}_{\underline{p}}^+(0)\hat{c}_{\underline{p}}(t)\rangle$ 的傅里叶变换, 则利用式 (5.3.11) 和式 (5.3.12) 得

$$\begin{aligned}\langle H\rangle &= \frac{1}{2}\lim_{t\to 0}\sum_{\underline{p}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\omega\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\left(\omega+\frac{\underline{p}^2}{2m}+\mu\right)\tilde{S}(\underline{p},\omega)\\ &=\frac{\mathrm{i}}{2}\lim_{t\to 0}\sum_{\underline{p}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\omega\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\left(\omega+\frac{\underline{p}^2}{2m}+\mu\right)\frac{g(\underline{p},\omega+\mathrm{i}0^+)-g(\underline{p},\omega-\mathrm{i}0^+)}{\mathrm{e}^{\beta\omega}\mp 1}\end{aligned}\tag{5.3.15}$$

利用这个关系, 可以容易由能量来计算很多热力学量.

二、谱密度函数

由 S^{AB} 可以构建所有响应函数. 事实上对于因果响应函数有

$$\chi_{AB}^{\mathrm{c}}(t-t')=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\chi_{AB}^{\mathrm{c}}(\omega)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t')}\tag{5.3.16}$$

其中

$$\chi_{AB}^{\mathrm{c}}(\omega)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega'}{2\pi}\left[\frac{\mp\mathrm{e}^{-\beta\omega'}S^{AB}(\omega')}{\omega'-\omega+\mathrm{i}0^+}-\frac{S^{AB}(\omega')}{\omega'-\omega-\mathrm{i}0^+}\right]\tag{5.3.17}$$

证明　当 $t>t'$ 时, 在式 (5.3.16) 中可选下半平面围道, 这样由残数定理知只有式 (5.3.17) 中的第二项才做贡献. 故将式 (5.3.17) 代入式 (5.3.16) 的右端得

$$-\mathrm{i}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega'}{2\pi}S^{AB}(\omega')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega'(t-t')}=-\mathrm{i}S^{AB}(t-t')=-\mathrm{i}\langle A(t)B(t')\rangle$$

类似地, 当 $t<t'$ 时, 可知将式 (5.3.17) 代入式 (5.3.16) 的右端得出 $\mp\mathrm{i}\langle\hat{B}(t')\hat{A}(t)\rangle$. 这正好符合 $\chi_{AB}^{\mathrm{c}}(t-t')$ 的定义.

同样可证有

$$\chi_{AB}^{\mathrm{r}}(\omega)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega'}{2\pi}\frac{(1\mp\mathrm{e}^{-\beta\omega'})S^{AB}(\omega')}{\omega-\omega'+\mathrm{i}0^+}\tag{5.3.18}$$

$$\chi_{AB}^{\mathrm{a}}(\omega)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega'}{2\pi}\frac{(1\mp\mathrm{e}^{-\beta\omega'})S^{AB}(\omega')}{\omega-\omega'-\mathrm{i}0^+}\tag{5.3.19}$$

定义谱密度函数$\rho^{AB}(\omega)$ 为

$$\rho^{AB}(\omega) \equiv (1 \mp \mathrm{e}^{-\beta\omega}) S^{AB}(\omega) \tag{5.3.20}$$

则式 (5.3.18) 和式 (5.3.19) 可改写为

$$\chi^{\mathrm{r}}_{AB}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}\omega'}{2\pi} \frac{\rho^{AB}(\omega')}{\omega - \omega' + \mathrm{i}0^+} \tag{5.3.21}$$

$$\chi^{\mathrm{a}}_{AB}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}\omega'}{2\pi} \frac{\rho^{AB}(\omega')}{\omega - \omega' - \mathrm{i}0^+} \tag{5.3.22}$$

它们称为**响应函数的谱表示**. 由式 (5.3.21) 知

$$\rho^{AB}(\omega) = -2\mathrm{Im}\chi^{\mathrm{r}}_{AB}(\omega) = -2\mathrm{Im}\chi_{AB}(\omega + \mathrm{i}0^+) \tag{5.3.23}$$

注意: 这里定义的谱密度函数 $\rho^{AB}(\omega)$ 比第二章中的 $\rho(\omega)$ 多一个 2π 因子.

三、求和法则及严格关系式

以下讨论一些严格关系式. 由于对于实际体系的计算, 通常无法得到精确解, 因而这些严格关系式将有助于判断我们所采用的近似方法以及所得结果是否合适.

由耗散–涨落定理式 (5.3.5) 和式 (5.3.20) 可知

$$\rho^{AB}(\omega) = \mathrm{i}\left[\chi_{AB}(\omega + \mathrm{i}0^+) - \chi_{AB}(\omega - \mathrm{i}0^+)\right] \tag{5.3.24}$$

因此式 (5.3.5) 又可写成

$$S^{AB}(\omega) = \frac{\rho^{AB}(\omega)}{1 \mp \mathrm{e}^{-\beta\omega}} \tag{5.3.5a}$$

同样有

$$\tilde{S}^{AB}(\omega) = \frac{\rho^{AB}(\omega)}{\mathrm{e}^{\beta\omega} \mp 1} \tag{5.3.11a}$$

它将关联函数和响应函数的耗散部分 (即虚部) 直接联系起来了.

现在考虑积分

$$\begin{aligned}\chi_{AB}(z) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi} \frac{\rho^{AB}(\omega)}{z - \omega} \\ &= \frac{\mathrm{i}}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega \frac{\chi^{\mathrm{r}}_{AB}(\omega)}{z - \omega} - \frac{\mathrm{i}}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega \frac{\chi^{\mathrm{a}}_{AB}(\omega)}{z - \omega}\end{aligned} \tag{5.3.25}$$

当 $\mathrm{Im}z > 0$ 时, 式 (5.3.25) 右端第二项的积分为零, 这是因为其被积函数是下半平面上的解析函数, 且当 $|\omega| \to \infty$ 时, 比 $1/\omega$ 更快地趋于零 (参见式 (5.3.21)). 如果

选取由下半平面的无穷半圆周和实轴构成的围道, 则由残数定理可断定上述结论成立. 故

$$\chi_{AB}(z) = \frac{\mathrm{i}}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega' \frac{\chi_{AB}^{\mathrm{r}}(\omega')}{z-\omega'} \tag{5.3.26}$$

这样可以令 $z = \omega + \mathrm{i}0^+$, 得

$$\chi_{AB}^{\mathrm{r}}(\omega) = \frac{\mathrm{i}}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega' \frac{\chi_{AB}^{\mathrm{r}}(\omega')}{\omega-\omega'+\mathrm{i}0^+} \tag{5.3.27}$$

由此可得出著名的 **Kramers-Kronig 色散关系**:

$$\mathrm{Re}\chi_{AB}^{\mathrm{r}}(\omega) = \frac{1}{\pi}\mathrm{P}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega' \frac{\mathrm{Im}\chi_{AB}^{\mathrm{r}}(\omega)}{\omega'-\omega} \tag{5.3.28}$$

$$\mathrm{Im}\chi_{AB}^{\mathrm{r}}(\omega) = -\frac{1}{\pi}\mathrm{P}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega' \frac{\mathrm{Re}\chi_{AB}^{\mathrm{r}}(\omega)}{\omega'-\omega} \tag{5.3.29}$$

类似地有

$$\mathrm{Re}\chi_{AB}^{\mathrm{a}}(\omega) = -\frac{1}{\pi}\mathrm{P}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega' \frac{\mathrm{Im}\chi_{AB}^{\mathrm{a}}(\omega)}{\omega'-\omega} \tag{5.3.30}$$

$$\mathrm{Im}\chi_{AB}^{\mathrm{a}}(\omega) = \frac{1}{\pi}\mathrm{P}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega' \frac{\mathrm{Re}\chi_{AB}^{\mathrm{a}}(\omega)}{\omega'-\omega} \tag{5.3.31}$$

考虑如下的**密度–密度关联函数**:

$$C^{\rho}(t,\underline{p}) \equiv \langle \hat{\rho}_{\underline{p}}(t)\hat{\rho}_{-\underline{p}}(0)\rangle \tag{5.3.32}$$

其中

$$\hat{\rho}_{\underline{p}} \equiv \sum_{\underline{q}} \hat{c}_{\underline{q}}^{+}\hat{c}_{\underline{p}+\underline{q}} \tag{5.3.33}$$

从而有

$$\hat{\rho}_{\underline{p}}^{+} = \hat{\rho}_{-\underline{p}} \tag{5.3.34}$$

可以证明 $C^{\rho}(\underline{p},t)$ 的时间傅里叶变换为

$$C^{\rho}(\underline{p},\omega) = \frac{1}{Z}\sum_{\nu N\nu'} \mathrm{e}^{-\beta(E_{N\nu}-\mu N)}|\langle\nu N|\hat{\rho}_{\underline{p}}|\nu' N\rangle|^2\delta(\omega - E_{N\nu'} + E_{N\nu}) \tag{5.3.35}$$

由此知

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega\omega C^{\rho}(\underline{p},\omega) = \frac{1}{Z}\sum_{\nu N\nu'} \mathrm{e}^{-\beta(E_{N\nu}-\mu N)}|\langle\nu N|\hat{\rho}_{\underline{p}}|\nu' N\rangle|^2(E_{N\nu'} - E_{N\nu}) \tag{5.3.36}$$

该式的右端可以写成 $-\frac{1}{2}\left\langle\left[\hat{\rho}_{\underline{p}},\left[\hat{\rho}_{-\underline{p}},\hat{H}\right]\right]\right\rangle$. 直接计算这个二重对易子, 得

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\omega\omega C^{\rho}(\underline{p},\omega)=\frac{\underline{p}^2}{2m}\langle\hat{N}\rangle \tag{5.3.37}$$

又因

$$\begin{aligned}\chi_{AB}(z)&=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\frac{\rho^{AB}(\omega)}{z-\omega}\\&=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\rho^{AB}(\omega)\frac{1}{z}\left(1+\frac{\omega}{z}+\frac{\omega^2}{z^2}+\cdots\right)\end{aligned} \tag{5.3.38}$$

只要级数有适当收敛性质. 另外, 又有

$$\begin{aligned}\chi_{AB}(z)=&\frac{1}{Z}\sum_{\nu\nu' NN'}\mathrm{e}^{-\beta(E_{N\nu}-\mu N)}\\&\cdot\left\{\langle\nu N|\hat{A}|\nu' N'\rangle\langle\nu' N'|\hat{B}|\nu N\rangle\frac{1}{z}\left[1+\frac{E_{N'\nu'}-E_{N\nu}-\mu(N'-N)}{z}+\cdots\right]\right.\\&\left.\mp\langle\nu N|\hat{B}|\nu' N'\rangle\langle\nu' N'|\hat{A}|\nu N\rangle\frac{1}{z}\left[1+\frac{E_{N\nu}-E_{N'\nu'}+\mu(N'-N)}{z}+\cdots\right]\right\}\\=&\frac{1}{z}\langle\hat{A}\hat{B}\mp\hat{B}\hat{A}\rangle+\frac{1}{z^2}\langle[\hat{A},\hat{H}^{\mu}]\hat{B}\mp\hat{B}[\hat{A},\hat{H}^{\mu}]\rangle+\cdots\end{aligned} \tag{5.3.39}$$

同样要求级数收敛才行. 比较式 (5.3.38) 和式 (5.3.39), 得

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\rho^{AB}(\omega)=\langle\hat{A}\hat{B}\mp\hat{B}\hat{A}\rangle \tag{5.3.40}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\omega\rho^{AB}(\omega)=\left\langle\left[[\hat{A},\hat{H}^{\mu}],\hat{B}\right]_{\mp}\right\rangle \tag{5.3.41}$$

由式 (5.3.39) 和式 (5.3.40) 知

$$\chi_{AB}(z)=\frac{1}{z}\langle AB\mp BA\rangle\quad(\text{若}|z|\to\infty) \tag{5.3.42}$$

特别地, 所有结论和公式也适用于当 $\hat{A}=\hat{c}_{\underline{p}},\hat{B}=\hat{c}_{\underline{p}}^{+}$ 时的单粒子格林函数这一特例. 例如, 有公式:

$$\lim_{z\to\infty}g(z,\underline{p})=z^{-1}\langle\hat{c}_{\underline{p}}\hat{c}_{\underline{p}}^{+}\mp\hat{c}_{\underline{p}}^{+}\hat{c}_{\underline{p}}\rangle=z^{-1} \tag{5.3.43}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\rho_{\underline{p}}(\omega)=1 \tag{5.3.44}$$

其中, $\rho_{\underline{p}}(\omega)\equiv\rho^{c_{\underline{p}}c_{\underline{p}}^{+}}(\omega)$. 注意到此时 $t=t'=0$, 并利用式 (5.3.12) 可得

$$\langle \hat{n}_{\underline{p}} \rangle = \langle \hat{c}^+_{\underline{p}} \hat{c}_{\underline{p}} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi} \tilde{S}^{cc^+}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi} \frac{\rho_{\underline{p}}(\omega)}{\mathrm{e}^{\beta\omega} \mp 1} \tag{5.3.45}$$

由于 $1/(\mathrm{e}^{\beta\omega} \mp 1)$ 是粒子的分布函数, 故由式 (5.3.44) 和式 (5.3.45) 可以看出**谱密度的物理意义**为在状态空间 $\underline{p}$ 点的态密度.

第四节　响应函数的计算

本节只讨论如何利用费曼图的方法来计算各类响应函数, 而在下一节将讨论如何利用运动方程方法来计算响应函数. 常见的一些算符及其响应函数如下.

(1) 电荷密度算符　　　　电荷极化率

$\hat{\rho}_{\mathrm{e}}(\underline{x}, \tau) = \hat{\psi}^+_\alpha(\underline{x}, \tau) \hat{\psi}_\alpha(\underline{x}, \tau)$　　　　χ_{e}

其中, 重复自旋指标自动求和.

(2) 自旋密度算符　　　　自旋磁化率 (spin susceptibility)

$\underline{\hat{S}}(\underline{x}, \tau) = \hat{\psi}^+_\alpha(\underline{x}, \tau) \left(\frac{\underline{\sigma}}{2}\right)_{\alpha\beta} \hat{\psi}_\beta(\underline{x}, \tau)$　　　　χ_{S}

(3) 电流密度算符　　　　电导

$\underline{\hat{j}}(\underline{x}, \tau) = \frac{e}{m} \hat{\psi}^+_\alpha(\underline{x}, \tau) \left(-\mathrm{i} \overleftrightarrow{\nabla} - e\underline{A}\right) \hat{\psi}_\alpha(\underline{x}, \tau)$　　　　σ

等.

计算方法

先利用费曼图计算虚时响应函数; 然后解析延拓到实频率; 进而可求出各类响应函数以及谱密度函数 $\rho^{AB}(\omega)$.

若我们感兴趣的量是和算符 $\hat{A}(\underline{x}, t)$ 对应的响应函数 χ. 这里

$$\hat{A}(\underline{x}, t) = \hat{\psi}^+_\alpha(\underline{x}, t) A_{\alpha\beta} \hat{\psi}_\beta(\underline{x}, t) \tag{5.4.1}$$

虚时响应函数为

$$\chi(\underline{x}, \tau) \equiv -\langle T \hat{A}(\underline{x}, \tau) \hat{A}(\underline{0}, 0) \rangle \tag{5.4.2}$$

其傅里叶变换为

$$\chi(\underline{p}, \mathrm{i}\omega_n) \equiv \int_0^\beta \mathrm{d}\tau \int \mathrm{d}^3x \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n\tau} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\underline{p}\cdot\underline{x}} \chi(\underline{x}, \tau) \tag{5.4.3}$$

一旦求出了 $\chi(\underline{p}, \mathrm{i}\omega_n)$, 我们就可以实施解析延拓.

由于有

$$-\chi(\underline{x}, \tau) = \langle T \hat{\psi}^+_\alpha(\underline{x}, \tau) A_{\alpha\beta} \hat{\psi}_\beta(\underline{x}, \tau) \hat{\psi}^+_\gamma(\underline{0}, 0) A_{\gamma\delta} \hat{\psi}_\delta(\underline{0}, 0) \rangle$$

$$=A_{\alpha\beta}A_{\gamma\delta}\langle T\hat{\psi}^{+}_{\alpha\mathrm{I}}(\underline{x},\tau)\hat{\psi}_{\beta\mathrm{I}}(\underline{x},\tau)\hat{\psi}^{+}_{\gamma\mathrm{I}}(\underline{0},0)\hat{\psi}_{\delta\mathrm{I}}(\underline{0},0)S(\beta,0)\rangle_{\mathrm{C}} \qquad (5.4.4)$$

其中, 下标 C 表示仅考虑所有连通图, 当无外部扰动时的体系的哈密顿为 $\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}'$ 时, $S(\beta,0)=T_\tau \mathrm{e}^{-\int_0^\beta \mathrm{d}\tau H'(\tau)}$, 下标 I 表相互作用绘景. 由广义 Wick 定理可以看出, 其费曼图中存在两类顶角, 一类顶角来自演化算符 $S(\beta,0)$ 中的相互作用, 另一类来自于算符 $\hat{A}(\underline{x},t)$, 我们称为 **A-顶角**, 如图 5.4.1 所示. 而虚时响应函数 χ 可以用所有连通且闭合的有两个 A-顶角的图的和来表示 (图 5.4.2). 图 5.4.2 中阴影部分是任意的满足费曼规则的图形的和.

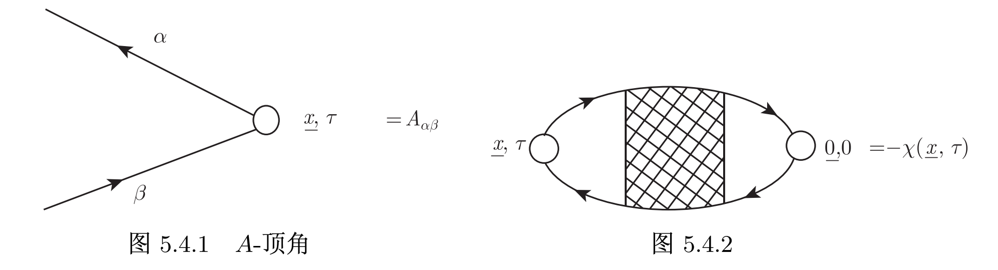


图 5.4.1　A-顶角　　　　图 5.4.2

作为一个例子, 我们用此法计算自由电子体系的**自旋磁化率**. 由于**自旋密度算符**为

$$\underline{\hat{S}}(\underline{x},\tau)=\hat{\psi}^{+}_{\alpha}(\underline{x},\tau)\left(\frac{\underline{\sigma}}{2}\right)_{\alpha\beta}\hat{\psi}_{\beta}(\underline{x},\tau) \qquad (5.4.5)$$

故磁矩算符为

$$\underline{\hat{A}}(\underline{x},\tau)\equiv\gamma\underline{\hat{S}}(\underline{x},\tau)=\mu_{\mathrm{B}}\hat{\psi}^{+}_{\alpha}(\underline{x},\tau)\underline{\sigma}_{\alpha\beta}\hat{\psi}_{\beta}(\underline{x},\tau) \qquad (5.4.6)$$

其中, μ_{B} 为玻尔磁子. 因外磁场所施加的微扰哈密顿也正比于磁矩, 故相对应的响应函数 $\chi^{ij}(i,j=1,2,3)$ 为

$$-\chi^{ij}(\underline{x},\tau)=\langle T\hat{A}^{i}(\underline{x},\tau)\hat{A}^{j}(0,\underline{0})\rangle$$

= 　$\mu_{\mathrm{B}}\sigma^{i}_{\alpha\beta}$　$(\underline{x}\ \tau)$　α　δ　β　γ　$(\underline{0}\ 0)$　$\mu_{\mathrm{B}}\sigma^{j}_{\gamma\delta}$

$$=\mu_{\mathrm{B}}^{2}\sigma^{i}_{\alpha\beta}\sigma^{j}_{\gamma\delta}g^{0}_{\delta\alpha}(-\underline{x},-\tau)g^{0}_{\beta\gamma}(\underline{x},\tau) \qquad (5.4.7)$$

由于

$$\chi(\underline{p},\mathrm{i}\nu_n)\equiv\int_0^\beta\mathrm{d}\tau\int\mathrm{d}^3x\mathrm{e}^{\mathrm{i}\nu_n\tau}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\underline{p}\cdot\underline{x}}\chi(\underline{x},\tau)$$

且其中

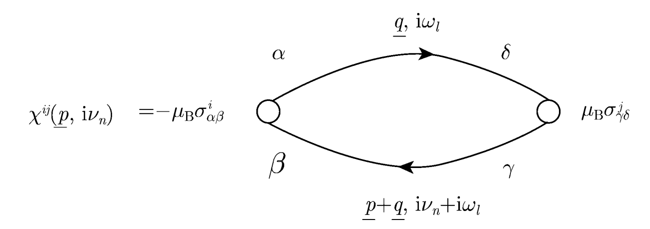
$$g^{0}(\underline{x},\tau)=\frac{1}{\beta V}\sum_{\underline{q}l}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{q}\cdot\underline{x}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_l\tau}g^{0}(\underline{q},\mathrm{i}\omega_l) \qquad (5.4.8)$$

故不难利用式 (5.4.7) 和式 (5.4.8) 得出

$$\chi^{ij}(\underline{p}, \mathrm{i}\nu_n) = -\frac{\mu_{\mathrm{B}}^2}{\beta V}\sum_{\underline{q},l}\sigma^i_{\alpha\beta}\sigma^j_{\gamma\delta}g^0_{\delta\alpha}(\underline{q}, \mathrm{i}\omega_l)g^0_{\beta\gamma}(\underline{p}+\underline{q}, \mathrm{i}\nu_n+\mathrm{i}\omega_l) \tag{5.4.9}$$

其中, $\nu_n = 2n\pi/\beta$; $\omega_l = (2l+1)\pi/\beta$.

它可用图形表示为



这样, **动量空间中的费曼规则**要求如下:

(1) 两条传播子上的动量和频率分别为 $(\underline{q}, \mathrm{i}\omega_l)$ 和 $(\underline{p}+\underline{q}, \mathrm{i}\nu_n+\mathrm{i}\omega_l)$;

(2) 每个内动量圈有一个因子 $-1/(\beta V)$.

利用

$$\mathrm{tr}\left(\sigma^i\sigma^j\right) = \mathrm{tr}\left(\delta_{ij}I + \mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\sigma^k\right) = 2\delta_{ij} \tag{5.4.10}$$

其中, 求迹是对自旋指标进行的; I 为 2 阶单位矩阵; ε_{ijk} 为 Levi-Civita 全反称张量. 可以得出

$$\chi^{ij}(\underline{p}, \mathrm{i}\nu_n) = -\frac{2\mu_{\mathrm{B}}^2}{\beta V}\delta_{ij}\sum_{\underline{q},r}g^0(\underline{q}, \mathrm{i}\omega_r)g^0(\underline{p}+\underline{q}, \mathrm{i}\nu_n+\mathrm{i}\omega_r) \tag{5.4.11}$$

令

$$\chi^{ij}(\underline{p}, \mathrm{i}\nu_n) = \delta_{ij}\chi(\underline{p}, \mathrm{i}\nu_n) \tag{5.4.12}$$

则式 (5.4.11) 给出为

$$\chi(\underline{p}, \mathrm{i}\nu_n) = -\frac{2\mu_{\mathrm{B}}^2}{\beta}\int\frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^3}\sum_r g^0(\underline{q}, \mathrm{i}\omega_r)g^0(\underline{p}+\underline{q}, \mathrm{i}\nu_n+\mathrm{i}\omega_r) \tag{5.4.13}$$

再利用泊松频率求和公式 (3.2.27) 知

$$\begin{aligned}&\frac{1}{\beta}\sum_r g^0(\underline{q}, \mathrm{i}\omega_r)g^0(\underline{p}+\underline{q}, \mathrm{i}\nu_n+\mathrm{i}\omega_r)\\=&\frac{-1}{2\pi\mathrm{i}}\int_{C'}\mathrm{d}z g^0(\underline{q}, z)g^0(\underline{p}+\underline{q}, \mathrm{i}\nu_n+z)\frac{1}{\mathrm{e}^{\beta z}+1}\\=&\frac{n_{\mathrm{F}}(\underline{q})-n_{\mathrm{F}}(\underline{p}+\underline{q})}{\varepsilon^0_q-\varepsilon^0_{p+q}+\mathrm{i}\nu_n}\end{aligned} \tag{5.4.14}$$

其中, 利用了 $\exp(-\mathrm{i}\beta\nu_n)=1$ 以及费米函数 $n_{\mathrm{F}}(\underline{q})$ 的定义:

$$n_{\mathrm{F}}(\underline{q})\equiv\frac{1}{\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon_q^0-\mu)}+1} \tag{5.4.15}$$

故

$$\chi(\underline{p},\mathrm{i}\omega_n)=-2\mu_{\mathrm{B}}^2\int\frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^3}\frac{n_{\mathrm{F}}(\underline{q})-n_{\mathrm{F}}(\underline{p}+\underline{q})}{\varepsilon_q^0-\varepsilon_{p+q}^0+\mathrm{i}\omega_n} \tag{5.4.16}$$

现在作解析延拓:

$$\chi(\underline{p},\omega)=-2\mu_{\mathrm{B}}^2\int\frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^3}\frac{n_{\mathrm{F}}(\underline{q})-n_{\mathrm{F}}(\underline{p}+\underline{q})}{\varepsilon_q^0-\varepsilon_{p+q}^0+\omega+\mathrm{i}0^+} \tag{5.4.17}$$

由此可进而求出各种实时响应函数及提取物理信息. 例如, 可直接给出自旋涨落谱

$$\mathrm{Im}\chi(\underline{p},\omega+\mathrm{i}0^+)=2\mu_{\mathrm{B}}^2\int\frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^3}\pi\delta(\varepsilon_{p+q}^0-\varepsilon_q^0-\omega)[n_{\mathrm{F}}(\underline{q})-n_{\mathrm{F}}(\underline{p}+\underline{q})] \tag{5.4.18}$$

在 $\omega=0,\underline{p}\to 0$ 的极限下, 有

$$\begin{aligned}\lim_{\underline{p}\to 0}\chi(\underline{p},\omega=0)&=-2\mu_{\mathrm{B}}^2\int\frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^3}\frac{n_{\mathrm{F}}(\underline{p}+\underline{q})-n_{\mathrm{F}}(\underline{q})}{\varepsilon_{p+q}^0-\varepsilon_q^0}\\&=-2\mu_{\mathrm{B}}^2\int\frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^3}\frac{\mathrm{d}n_{\mathrm{F}}(\underline{q})}{\mathrm{d}\varepsilon_{\underline{q}}^0}\end{aligned} \tag{5.4.19}$$

在零温极限下, 有

$$\frac{\mathrm{d}n_{\mathrm{F}}(\underline{q})}{\mathrm{d}\varepsilon_{\underline{q}}^0}=\frac{\mathrm{d}\theta(\varepsilon_{\mathrm{F}}-\varepsilon_{\underline{q}}^0)}{\mathrm{d}\varepsilon_{\underline{q}}^0}=-\delta(\varepsilon_{\mathrm{F}}-\varepsilon_{\underline{q}}^0) \tag{5.4.20}$$

利用

$$\begin{aligned}\int\frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^3}\delta(\varepsilon_{\mathrm{F}}-\varepsilon_{\underline{q}}^0)&=\int\frac{4\pi|\underline{q}|^2\mathrm{d}|\underline{q}|}{(2\pi)^3}\delta\left(\frac{p_{\mathrm{F}}^2}{2m}-\frac{\underline{q}^2}{2m}\right)\\&=\frac{2m}{2\pi^2}\int\mathrm{d}|\underline{q}||\underline{q}|^2\delta(p_{\mathrm{F}}^2-\underline{q}^2)\\&=\frac{2m}{2\pi^2}\int_0^{p_{\mathrm{F}}}\mathrm{d}|\underline{q}||\underline{q}|^2\left\{\frac{1}{2p_{\mathrm{F}}}\left[\delta(|\underline{q}|-p_{\mathrm{F}})+\delta(|\underline{q}|+p_{\mathrm{F}})\right]\right\}\\&=\frac{mp_{\mathrm{F}}}{2\pi^2}\end{aligned} \tag{5.4.21}$$

其中, $p_{\mathrm{F}}\equiv|\underline{p}_{\mathrm{F}}|$ 是费米动量. 上式实际上是费米能级处每个自旋的态密度. 将式 (5.4.20) 和式 (5.4.21) 代入式 (5.4.19) 得

$$\lim_{\underline{p}\to 0}\chi(\underline{p},\omega=0)=\mu_{\mathrm{B}}^2\frac{mp_{\mathrm{F}}}{\pi^2}=\frac{3n\mu_{\mathrm{B}}^2}{2\varepsilon_{\mathrm{F}}} \tag{5.4.22}$$

这里利用了式 (2.6.23) 所给出的费米海中的费米子数密度 n 所满足的关系式 $n=p_{\mathrm{F}}^3/(3\pi^2)$.

第五节　应用举例: 介电响应

作为前面所介绍的关联函数以及 Kramers-Kronig 关系的应用, 我们讨论和频率及动量有关的广义介电函数 $\varepsilon(\underline{q},\omega)$, 它描述有电磁场时介质的极化性质.

若引入一个试验电荷密度 $\phi_q \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\omega t-\underline{q}\cdot\underline{x})}$ 到电子气中, 则试验电荷所产生的额外势能为

$$\hat{H}_{1t}=\sum_j\int \mathrm{d}^3x\frac{\mathrm{e}\phi_q}{|\underline{x}-\underline{x}_j|}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\omega t-\underline{q}\cdot\underline{x})} \tag{5.5.1}$$

其中, $\underline{x}_j$ 为电子坐标, 利用 $\boldsymbol{\nabla}^2\dfrac{1}{|\underline{x}-\underline{x}_j|}=-4\pi\delta(\underline{x}-\underline{x}_j)$ 和分部积分法可知

$$\int \mathrm{d}^3x\frac{1}{|\underline{x}-\underline{x}_j|}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{q}\cdot\underline{x}}=\frac{-1}{\underline{q}^2}\int \mathrm{d}^3x\frac{1}{|\underline{x}-\underline{x}_j|}\boldsymbol{\nabla}^2\mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{q}\cdot\underline{x}}=\frac{4\pi}{\underline{q}^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{q}\cdot\underline{x}_j}$$

又利用式 (1.4.47) 得

$$\hat{H}_{1t}=\frac{4\pi\mathrm{e}}{\underline{q}^2}\phi_q\rho_{-q}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \tag{5.5.2}$$

由线性响应理论式 (5.1.18) 知

$$\begin{aligned}\langle\hat{\rho}_q\rangle_T&=\frac{4\pi\mathrm{e}}{\underline{q}^2}\phi_q\rho_{-q}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t'\langle\langle\hat{\rho}_q(t),\hat{\rho}_{-q}(t')\rangle\rangle_{\mathrm{r}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t'}\\&=\frac{4\pi\mathrm{e}}{\underline{q}^2}\phi_q\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\langle\langle\hat{\rho}_q;\hat{\rho}_{-q}:\omega\rangle\rangle_{\mathrm{r}}\end{aligned} \tag{5.5.3}$$

另外, 电位移矢量 $\underline{D}_q$ 由泊松方程确定:

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\underline{D}_q=4\pi\phi_q\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\omega t-\underline{q}\cdot\underline{x})}$$

而电场 $\underline{E}_q$ 由下式确定:

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\underline{E}_q=4\pi\left[\phi_q\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\omega t-\underline{q}\cdot\underline{x})}+\mathrm{e}\langle\hat{\rho}(\underline{x})\rangle_q\right]$$

其中, $\hat{\rho}(\underline{x})$ 是体系的粒子密度. 在各向同性体系情形, $\underline{D}_q$、$\underline{E}_q$ 和 $\langle\hat{\rho}(\underline{x})\rangle_q$ 将如同 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{q}\cdot\underline{x}}$ 一样变化. 故上述泊松方程可写成

$$\mathrm{i}\underline{q}\cdot\underline{D}_q=4\pi\phi_q\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\omega t-\underline{q}\cdot\underline{x})}$$

$$\mathrm{i}\underline{q}\cdot\underline{E}_q=4\pi\left[\phi_q\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\omega t-\underline{q}\cdot\underline{x})}+\frac{e}{V}\langle\hat{\rho}_q\rangle\mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{q}\cdot\underline{x}}\right]$$

定义 (复) 介电函数$\varepsilon(\underline{q},\omega)$ 为 $\underline{D}_q=\varepsilon(\underline{q},\omega)\underline{E}_q$, 则有

$$[\varepsilon(\underline{q},\omega)]^{-1}=1+\frac{e}{V}\langle\hat{\rho}_q\rangle\frac{1}{\phi_q\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}}$$

利用式 (5.5.3) 可知

$$[\varepsilon(\underline{q},\omega)]^{-1} = 1 + \frac{4\pi e^2}{\underline{q}^2 V}\langle\langle\hat{\rho}_q;\hat{\rho}_{-q}:\omega\rangle\rangle_{\mathrm{r}} \tag{5.5.4}$$

这个关系式把介电函数和密度–密度关联函数联系了起来. 我们当然可以用各种近似方法来计算密度–密度关联函数, 从而可求出广义介电函数的各种近似值. 然而现在的兴趣是如何能给出求广义介电函数的各种近似方法的判据, 这得益于式 (5.5.4) 和 Kramers-Kronig 关系.

现运用 Kramers-Kronig 关系, 将给出

$$\mathrm{Re}\left[\frac{1}{\varepsilon(\underline{q},\omega)}\right] - 1 = \frac{1}{\pi}\mathrm{P}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\omega'\mathrm{Im}\left[\frac{1}{\varepsilon(\underline{q},\omega')}\right]\frac{1}{\omega'-\omega}$$

进一步应用如下事实: ① $\mathrm{Im}[1/\varepsilon(\underline{q},\omega')] = -\mathrm{Im}[1/\varepsilon(-\underline{q},-\omega')]$, 它对任意函数的傅里叶变换均成立; ② $-\mathrm{Im}[1/\varepsilon(-\underline{q},-\omega')] = -\mathrm{Im}[1/\varepsilon(\underline{q},-\omega')]$, 这来自于实空间的对称性. 所以有

$$\mathrm{Im}\left[1/\varepsilon(\underline{q},\omega')\right] = -\mathrm{Im}\left[1/\varepsilon(\underline{q},-\omega')\right] \tag{5.5.5}$$

现在作变量替换 $\omega' \to -\omega'$ 来计算 $(-\infty,0)$ 区间上的积分并与 $[0,\infty)$ 区间上的积分一起, 得

$$\mathrm{Re}\left[\frac{1}{\varepsilon(\underline{q},\omega)}\right] - 1 = \frac{2}{\pi}\mathrm{P}\int_{0}^{\infty}\mathrm{d}\omega'\mathrm{Im}\left[\frac{1}{\varepsilon(\underline{q},\omega')}\right]\frac{\omega'}{\omega'^2-\omega^2} \tag{5.5.6}$$

取上式 $\omega \to 0$ 的极限, 得

$$\mathrm{Re}\left[\frac{1}{\varepsilon(\underline{q},0)}\right] - 1 = \frac{2}{\pi}\mathrm{P}\int_{0}^{\infty}\mathrm{d}\omega'\frac{1}{\omega'}\mathrm{Im}\left[\frac{1}{\varepsilon(\underline{q},\omega')}\right] \tag{5.5.7}$$

一方面由式 (5.5.5) 知, $\mathrm{Re}\big[1/\varepsilon(\underline{q},0)\big] = 1/\varepsilon(\underline{q},0)$; 另一方面可以证明, 静态极限下的介电函数有如下行为:

$$\lim_{|\underline{q}|\to 0}\frac{1}{\varepsilon(\underline{q},0)} = 0 \tag{5.5.8}$$

注意: 式 (5.5.8) 可以在唯象的托马斯–费米模型中加以证明, 参见附录 5A. 在第二章第八节, 在零温情形及在链近似下也给出了这一结果, 事实上, 由式 (2.8.17) 和式 (2.8.21) 知

$$\lim_{|\underline{q}|\to 0}\varepsilon(q) = 1 - \lim_{|\underline{q}|\to 0}\frac{e^2}{\underline{q}^2}\Pi(0) \to \infty$$

此即式 (5.5.8).

故由式 (5.5.6) 可得到求和法则:

$$\lim_{|\underline{q}|\to 0}\int_0^{\infty} \mathrm{d}\omega' \frac{1}{\omega'} \mathrm{Im}\left[\frac{1}{\varepsilon(\underline{q},\omega')}\right] = -\frac{\pi}{2} \tag{5.5.9}$$

这是精确的结果, 可用作检验物理近似方案的判据. 虽然在这里讨论的只是介电函数, 但上述思想方法完全可用于我们感兴趣的其他物理量, 首先把这个量用推迟响应函数表示出来, 然后把推迟响应函数代入 Kramers-Kronig 关系. 如果这个依赖于频率的物理量在某个参考频率上是已知的, 那么就可以针对这一参考频率对 Kramers-Kronig 关系式作积分, 从而在一个非常一般的条件下建立起一个有关这个物理量的求和法则.

第六节　运动方程方法

一、响应函数的运动方程

除了图形微扰论方法外, 发展非微扰途径是极其重要的, 这对于研究诸如强关联体系等对象时是必须的. 运动方程方法就是其中的一种.

对于算符 $\hat{A}(t)$, 有

$$\hat{A}(t) \equiv \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}^{\mu}t}\hat{A}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}^{\mu}t} \tag{5.6.1}$$

其中, $\hat{A}$ 不显含时间. 它满足海森伯运动方程:

$$\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}\hat{A}(t)}{\mathrm{d}t} = \left[\hat{A}(t), \hat{H}^{\mu}\right] \tag{5.6.2}$$

利用式 (5.6.1) 和式 (5.6.2), 可得 $\langle\langle\hat{A}(t),\hat{B}(t')\rangle\rangle$ 满足的**运动方程**

$$\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\langle\hat{A}(t),\hat{B}(t')\rangle\rangle = \delta(t-t')\left\langle\left[\hat{A}(t),\hat{B}(t')\right]_{\mp}\right\rangle + \left\langle\left\langle\left[\hat{A}(t),\hat{H}^{\mu}\right],\hat{B}(t')\right\rangle\right\rangle \tag{5.6.3}$$

其中, $\langle\langle\hat{A}(t),\hat{B}(t')\rangle\rangle$ 可代表推迟、超前或因果响应函数中的任一种. 因它们均满足相同的运动方程, 故暂不用角标区分. 式 (5.6.3) 中, 右边第一项由于有 $\delta(t-t')$ 的存在而可以进一步简化为 $\delta(t-t')\left\langle\left[\hat{A}(t),\hat{B}(t)\right]_{\mp}\right\rangle = \delta(t-t')\left\langle\left[\hat{A},\hat{B}\right]_{\mp}\right\rangle$(参见式 (5.2.6) 的证明).

利用

$$\langle\langle\hat{A}(t),\hat{B}(t')\rangle\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t')}\langle\langle\hat{A};\hat{B}:\omega\rangle\rangle \tag{5.6.4}$$

$$\delta(t-t') = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t')} \tag{5.6.5}$$

再定义 $\left\langle\left\langle\left[\hat{A}(t),\hat{H}^{\mu}\right],\hat{B}(t')\right\rangle\right\rangle$ 的傅里叶变换为

$$\left\langle\left\langle\left[\hat{A}(t),\hat{H}^{\mu}\right];\hat{B}(t')\right\rangle\right\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t')}\left\langle\left\langle\left[\hat{A},\hat{H}^{\mu}\right];\hat{B}:\omega\right\rangle\right\rangle \tag{5.6.6}$$

则由式 (5.6.3) 得出运动方程:

$$\omega\langle\langle\hat{A};\hat{B}:\omega\rangle\rangle=\left\langle\left[\hat{A},\hat{B}\right]_{\mp}\right\rangle+\left\langle\left\langle\left[\hat{A},\hat{H}^{\mu}\right];\hat{B}:\omega\right\rangle\right\rangle \tag{5.6.7}$$

如果知道了 $\left\langle\left\langle\left[\hat{A}(t),\hat{H}^{\mu}\right],\hat{B}(t')\right\rangle\right\rangle$ 或 $\left\langle\left\langle\left[\hat{A},\hat{H}^{\mu}\right];\hat{B}:\omega\right\rangle\right\rangle$, 就可以求解运动方程 (5.6.3) 或 (5.6.7) 了. 然而 $\left\langle\left\langle\left[\hat{A}(t),\hat{H}^{\mu}\right],\hat{B}(t')\right\rangle\right\rangle$ 或 $\left\langle\left\langle\left[\hat{A},\hat{H}^{\mu}\right];\hat{B}:\omega\right\rangle\right\rangle$ 却是更为复杂的高阶关联函数. 以 $\left\langle\left\langle\left[\hat{A},\hat{H}^{\mu}\right];\hat{B}:\omega\right\rangle\right\rangle$ 为例, 它满足的运动方程仍为式 (5.6.7), 只不过需要用 $\hat{A}_1=\left[\hat{A},\hat{H}^{\mu}\right]$ 来代替 $\hat{A}$, 以此类推, 可得到一组耦合方程的无穷序列:

$$\omega\langle\langle\hat{A}_n;\hat{B}:\omega\rangle\rangle=\left\langle\left[\hat{A}_n,\hat{B}\right]_{\mp}\right\rangle+\langle\langle\hat{A}_{n+1};\hat{B}:\omega\rangle\rangle\quad(n=0,1,2,\cdots) \tag{5.6.8}$$

其中, $\hat{A}_0=\hat{A}$; $\hat{A}_{n+1}=\left[\hat{A}_n,\hat{H}^{\mu}\right]$. 由此可见这组方程不是封闭的. 因此在具体求解时, 往往要对高阶关联函数作某种截断近似, 使得方程组 (5.6.8) 在有限阶上封闭. 截断近似的准确程度决定于截断的方式, 即将高阶关联函数用低阶关联函数来表达的方式. 由于目前还没有这种方式普遍法则, 只能依靠经验和物理直觉, 更需将所得理论结果与实验及其他理论方法进行比较. 这种运动方程的方法在图形微扰论不能应用的情形特别有用, 但它在作出可控制的近似以及讨论这些近似的适用范围时难以应用.

作为例子, 考虑有两两相互作用的电子体系, 取 $\hat{A}=\hat{c}_{\underline{p}}$, $\hat{B}=\hat{c}_{\underline{p}}^{+}$. 则通过对易子计算, 得知式 (5.6.8) 中的前两个方程为

$$(\omega-\varepsilon_{\underline{p}}+\mu)\langle\langle\hat{c}_{\underline{p}};\hat{c}_{\underline{p}}^{+}:\omega\rangle\rangle=1+\frac{1}{V}\sum_{\underline{k},\underline{q}}V(\underline{q})\langle\langle\hat{c}_{\underline{k}}^{+}\hat{c}_{\underline{k}+\underline{q}}\hat{c}_{\underline{p}-\underline{q}};\hat{c}_{\underline{p}}^{+}:\omega\rangle\rangle \tag{5.6.9}$$

$$\begin{aligned}&(\omega-\varepsilon_{\underline{k}+\underline{q}}-\varepsilon_{\underline{p}-\underline{q}}+\varepsilon_{\underline{k}}+\mu)\langle\langle\hat{c}_{\underline{k}}^{+}\hat{c}_{\underline{k}+\underline{q}}\hat{c}_{\underline{p}-\underline{q}};\hat{c}_{\underline{p}}^{+}:\omega\rangle\rangle\\=&\langle\hat{c}_{\underline{k}}^{+}\hat{c}_{\underline{k}}\rangle\left(\delta_{\underline{q},0}-\delta_{\underline{p},\underline{k}+\underline{q}}\right)+\frac{1}{V}\sum_{\underline{k}'\underline{q}'}V(\underline{q}')\Big(\langle\langle\hat{c}_{\underline{k}}^{+}\hat{c}_{\underline{k}+\underline{q}}\hat{c}_{\underline{k}'}^{+}\hat{c}_{\underline{k}'-\underline{q}'}\hat{c}_{\underline{p}-\underline{q}+\underline{q}'};\hat{c}_{\underline{p}}^{+}:\omega\rangle\rangle\\&+\langle\langle\hat{c}_{\underline{k}}^{+}\hat{c}_{\underline{k}'}^{+}\hat{c}_{\underline{k}'-\underline{q}'}\hat{c}_{\underline{k}+\underline{q}+\underline{q}'}\hat{c}_{\underline{p}-\underline{q}};\hat{c}_{\underline{p}}^{+}:\omega\rangle\rangle\\&+\langle\langle\hat{c}_{\underline{k}'}^{+}\hat{c}_{\underline{k}+\underline{q}}^{+}\hat{c}_{\underline{k}'+\underline{q}'}\hat{c}_{\underline{k}+\underline{q}}\hat{c}_{\underline{p}-\underline{q}};\hat{c}_{\underline{p}}^{+}:\omega\rangle\rangle\Big)\end{aligned} \tag{5.6.10}$$

式 (5.6.9) 表明单粒子格林函数 $\langle\langle\hat{c}_{\underline{p}};\hat{c}_{\underline{p}}^{+}:\omega\rangle\rangle$ 的运动方程涉及如下复杂函数: $\langle\langle\hat{c}_{\underline{k}}^{+}\hat{c}_{\underline{k}+\underline{q}}\hat{c}_{\underline{p}-\underline{q}};\hat{c}_{\underline{p}}^{+}:\omega\rangle\rangle$, 我们将它称为两粒子格林函数(它含有两个产生算符和两个消灭算符).

两粒子格林函数的方程 (5.6.10) 中又涉及几个三粒子格林函数 (含有三个产生算符和三个消灭算符), 如此等等.

但是只要我们去寻求近似解, 那么这种困难的克服却由于式 (5.6.9) 中有一个因子 $V(\underline{q})$ 而变得可行. 为了获得 $\langle\langle\hat{c}_{\underline{p}};\hat{c}_{\underline{p}}^{+}:\omega\rangle\rangle$ 到一阶, 可以用 $\langle\langle\hat{c}_{\underline{k}}^{+}\hat{c}_{\underline{k}+\underline{q}}\hat{c}_{\underline{p}-\underline{q}};\hat{c}_{\underline{p}}^{+}:\omega\rangle\rangle$ 的展开式中的零阶项来插入到式 (5.6.9) 中. 可是我们又很少真正对格林函数的展开感兴趣, 原因有: ① 若在式 (5.6.9) 中除以 $(\omega-\varepsilon_{\underline{p}}+\mu)$ 来得到 $\langle\langle\hat{c}_{\underline{p}};\hat{c}_{\underline{p}}^{+}:\omega\rangle\rangle$, 即使 $V(\underline{q})$ 很小, 则其中最后一项在频率充分接近于 $\varepsilon_{\underline{p}}-\mu$ 的区域内将会任意地大, 并且这种区域才是我们最感兴趣的; ② 格林函数的极点位置蕴含了重要的物理信息, 因而我们对格林函数的倒数的展开比格林函数本身的展开更有兴趣. 为此作如下近似就可以在格林函数的分母中得到一阶项:

$$\langle\langle\hat{c}_{\underline{k}}^{+}\hat{c}_{\underline{k}+\underline{q}}\hat{c}_{\underline{p}-\underline{q}};\hat{c}_{\underline{p}}^{+}:\omega\rangle\rangle\simeq\langle\hat{c}_{\underline{k}}^{+}\hat{c}_{\underline{k}}\rangle\left(\delta_{\underline{q},0}-\delta_{\underline{p},\underline{k}+\underline{q}}\right)\langle\langle\hat{c}_{\underline{p}};\hat{c}_{\underline{p}}^{+}:\omega\rangle\rangle \tag{5.6.11}$$

这种近似相当于我们忽略了算符 $\hat{c}_{\underline{k}}^{+}\hat{c}_{\underline{k}'}$ 对其平均值 $\langle\hat{c}_{\underline{k}}^{+}\hat{c}_{\underline{k}'}\rangle$ 的涨落, 该平均值除非 $\underline{k}=\underline{k}'$ 否者为零. 这样有

$$\langle\langle\hat{c}_{\underline{p}};\hat{c}_{\underline{p}}^{+}:\omega\rangle\rangle\left(\omega-\varepsilon_{\underline{p}}+\mu-\sum_{\underline{k}}\langle\hat{c}_{\underline{k}}^{+}\hat{c}_{\underline{k}}\rangle\left[V(\underline{0})-V(|\underline{p}-\underline{k}|)\right]\right)=1 \tag{5.6.12}$$

由式 (5.3.23) 可得它的谱密度函数

$$\begin{aligned}\rho(\underline{p},\omega)&=-2\mathrm{Im}\langle\langle\hat{c}_{\underline{p}};\hat{c}_{\underline{p}}^{+}:\omega+\mathrm{i}0^{+}\rangle\rangle\\&=2\pi\delta\left(\omega-\varepsilon_{\underline{p}}+\mu-\sum_{\underline{k}}\langle\hat{c}_{\underline{k}}^{+}\hat{c}_{\underline{k}}\rangle\left[V(\underline{0})-V(|\underline{p}-\underline{k}|)\right]\right)\end{aligned}$$

由式 (5.3.45) 知, 这将导致

$$\langle c_{\underline{k}}^{+}c_{\underline{k}}\rangle=\frac{1}{\mathrm{e}^{\beta(E_{\underline{p}}-\mu)}+1} \tag{5.6.13}$$

其中

$$E_{\underline{p}}=\varepsilon_{\underline{p}}+\sum_{\underline{k}}\langle c_{\underline{k}}^{+}c_{\underline{k}}\rangle\left[V(\underline{0})-V(|\underline{p}-\underline{k}|)\right] \tag{5.6.14}$$

自洽方程组 (5.6.12)~(5.6.14), 给出了所谓的“**自洽 H-F 近似**”的结果. 然而对于 $\langle c_{\underline{k}}^{+}c_{\underline{k}}\rangle$ 来求解这些自洽方程却是困难的. 不过如果我们在上述方程组中用

$\langle \hat{c}^{+}_{\underline{k}} \hat{c}_{\underline{k}} \rangle_0$ 来代替 $\langle \hat{c}^{+}_{\underline{k}} \hat{c}_{\underline{k}} \rangle$ 来作进一步近似, 那么就可以得到所谓的 "非自洽 **H-F 近似**" 的结果.

除了运动方程 (5.6.3) 外, 还可以通过将算符 $\hat{B}(t')$ 对 t' 求导来得到另一种形式的运动方程:

$$\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t'}\langle\langle \hat{A}(t), \hat{B}(t')\rangle\rangle = -\delta(t-t')\left\langle \left[\hat{A}(t), \hat{B}(t')\right]_{\mp}\right\rangle + \left\langle\left\langle \hat{A}(t); \left[\hat{B}(t'), \hat{H}^{\mu}\right]\right\rangle\right\rangle \quad (5.6.15)$$

它的傅里叶变换是

$$\omega\langle\langle \hat{A}; \hat{B} : \omega\rangle\rangle = \langle [\hat{A}, \hat{B}]_{\mp}\rangle - \langle\langle \hat{A}; [\hat{B}, \hat{H}^{\mu}] : \omega\rangle\rangle \quad (5.6.16)$$

这也是我们后面要利用的关系式之一.

二、应用 1: 铁磁体的海森伯模型

考虑量子自旋 (1/2) 的海森伯哈密顿

$$\begin{aligned}\hat{H} &= -J\sum_{\langle ij\rangle} \underline{\hat{S}}_i \cdot \underline{\hat{S}}_j - \gamma\sum_i \hat{S}_i^z \\ &= -J\sum_{\langle ij\rangle}\left(\hat{S}_i^{+}\hat{S}_j^{-} + \hat{S}_i^z\hat{S}_j^z\right) - \gamma\sum_i \hat{S}_i^z\end{aligned} \quad (5.6.17)$$

其中, 自旋升降算符 $\hat{S}_i^{\pm} \equiv \hat{S}_i^x \pm \mathrm{i}\hat{S}_i^y$. 我们来计算关联函数 $\langle\langle \hat{S}_m^{+}; \hat{S}_n^{-} : \omega\rangle\rangle$, 利用式 (5.6.8) 以及公式

$$[\hat{S}_i^z, \hat{S}_j^{\pm}] = \pm\delta_{ij}\hat{S}_i^{\pm}, \quad [\hat{S}_i^{+}, \hat{S}_j^{-}] = 2\delta_{ij}\hat{S}_i^z \quad (5.6.18)$$

得到 $\langle\langle \hat{S}_m^{+}; \hat{S}_n^{-} : \omega\rangle\rangle$ 所满足的运动方程为

$$(\omega-\gamma)\langle\langle \hat{S}_m^{+}; \hat{S}_n^{-} : \omega\rangle\rangle = 2\delta_{mn}\langle \hat{S}_m^z\rangle + 2J\sum_{i\in\langle im\rangle}\langle\langle \hat{S}_i^z\hat{S}_m^{+} - \hat{S}_m^z\hat{S}_i^{+}; \hat{S}_n^{-} : \omega\rangle\rangle \quad (5.6.19)$$

其中, $i \in \langle im\rangle$ 表示格位 i 是格位 m 的所有最近邻格位. 而对于高阶关联函数 $\langle\langle \hat{S}_i^z\hat{S}_m^{+} - \hat{S}_m^z\hat{S}_i^{+}; \hat{S}_n^{-} : \omega\rangle\rangle$, 我们采用的截断近似是: 忽略 $\hat{S}_m^z$ 的涨落, 而用它的平均值 $\langle \hat{S}_m^z\rangle$ 来代替 $\hat{S}_m^z$, 然后忽略一个格位上的 $\hat{S}^z$ 与另一个格位上的 $\hat{S}^{+}$ 及 $\hat{S}^{-}$ 之间的关联. 这种近似常被称为**无规相近似**.

$$\langle\langle \hat{S}_i^z\hat{S}_m^{+} - \hat{S}_m^z\hat{S}_i^{+}; \hat{S}_n^{-} : \omega\rangle\rangle \approx \langle \hat{S}_i^z\rangle\langle\langle \hat{S}_m^{+}; \hat{S}_n^{-} : \omega\rangle\rangle - \langle \hat{S}_m^z\rangle\langle\langle \hat{S}_i^{+}; \hat{S}_n^{-} : \omega\rangle\rangle$$

这样, 退耦后的运动方程为

$$\left(\omega-\gamma-2J\sum_{i\in\langle im\rangle}\langle \hat{S}_i^z\rangle\right)\langle\langle \hat{S}_m^{+}; \hat{S}_n^{-} : \omega\rangle\rangle = 2\delta_{mn}\langle \hat{S}_m^z\rangle - 2J\langle \hat{S}_m^z\rangle\sum_{i\in\langle im\rangle}\langle\langle \hat{S}_i^{+}; \hat{S}_n^{-} : \omega\rangle \quad (5.6.20)$$

又因为有晶格的平移不变性, $\hat{S}^z$ 的平均值应该与格点位置无关. 定义 $\langle\langle\hat{S}_m^+;\hat{S}_n^-:\omega\rangle\rangle$ 的傅里叶变换

$$\langle\langle\hat{S}_m^+;\hat{S}_n^-:\omega\rangle\rangle=\frac{1}{N}\sum_{\underline{k}}\chi_{\underline{k}}^{S^+S^-}(\omega)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{k}\cdot(\underline{m}-\underline{n})} \tag{5.6.21}$$

其中, N 是点阵中总的自旋数; $\underline{m}$ 和 $\underline{n}$ 分别是格点 m 和 n 的晶格矢量. 上式的逆变换为

$$\chi_{\underline{k}}^{S^+S^-}(\omega)=\sum_{\underline{m}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\underline{k}\cdot(\underline{m}-\underline{n})}\langle\langle\hat{S}_m^+;\hat{S}_n^-:\omega\rangle\rangle \tag{5.6.22}$$

这样, 由式 (5.6.20) 可得

$$\left(\omega-\gamma-2nJ\langle\hat{S}^z\rangle\right)\chi_{\underline{k}}^{S^+S^-}(\omega)=2\langle\hat{S}^z\rangle-2nJ\langle\hat{S}^z\rangle\zeta_{\underline{k}}\chi_{\underline{k}}^{S^+S^-}(\omega) \tag{5.6.23}$$

其中, n 是任一个格位的最近邻格位数, 且

$$\zeta_{\underline{k}}=\frac{1}{n}\sum_{\underline{\delta}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{k}\cdot\underline{\delta}} \tag{5.6.24}$$

式中, $\underline{\delta}$ 是任一格位到其最近邻格位的矢量. 由式 (5.6.23) 求得

$$\chi_{\underline{k}}^{S^+S^-}(\omega)=\frac{2\langle\hat{S}^z\rangle}{\omega-E_{\underline{k}}} \tag{5.6.25}$$

其中

$$E_{\underline{k}}=\gamma+2nJ\langle\hat{S}^z\rangle(1-\zeta_{\underline{k}}) \tag{5.6.26}$$

式 (5.6.25) 表明在这种退耦方案中, 它描述了一个能量为 $E_{\underline{k}}$ 的无衰减的激发. 为了计算 $\langle\hat{S}^z\rangle$, 我们利用耗散涨落定理 (5.3.11), 并注意到

$$\begin{aligned}\langle\hat{S}^-\hat{S}^+\rangle&=\langle\hat{S}_m^-(t=0)\hat{S}_{n=m}^+(t'=0)\rangle\\&=\frac{1}{N}\sum_{\underline{k}}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\frac{\mathrm{i}}{\mathrm{e}^{\beta\omega}-1}\left[\chi_{\underline{k}}^{S^+S^-}(\omega+\mathrm{i}0^+)-\chi_{\underline{k}}^{S^+S^-}(\omega-\mathrm{i}0^+)\right]\\&=2\langle\hat{S}^z\rangle\varXi\end{aligned} \tag{5.6.27}$$

其中

$$\varXi=\frac{1}{N}\sum_{\underline{k}}\frac{1}{\mathrm{e}^{\beta E_{\underline{k}}}-1} \tag{5.6.28}$$

式 (5.6.27) 推导中的最后一步利用了式 (5.6.25).

若自旋是 1/2, 利用公式

$$\hat{S}^2=\hat{S}_z^2+\frac{1}{2}\left(\hat{S}^+\hat{S}^-+\hat{S}^-\hat{S}^+\right)$$

以及

$$[\hat{S}^+, \hat{S}^-] = 2\hat{S}_z$$

可得

$$\langle \hat{S}^- \hat{S}^+ \rangle = \frac{3}{4} - \langle \hat{S}^z \rangle - \langle (\hat{S}^z)^2 \rangle = \frac{1}{2} - \langle \hat{S}^z \rangle \tag{5.6.29}$$

所以

$$\langle \hat{S}^z \rangle = \frac{1}{2(1+2\varXi)} \quad (S = 1/2) \tag{5.6.30}$$

为了确定准粒子能量 $E_{\underline{k}}$, 只需联立求解方程 (5.6.26) 和方程 (5.6.30). 注意的是, 式 (5.6.30) 表明有自发磁化现象的存在. 在一定温度 T_{c} 下, 即使当外磁场 B 不为零时 ($\gamma \propto B \neq 0$), 体系仍有非零的磁化 (它正比于 $\langle \hat{S}^z \rangle$).

三、应用 2: 单能级量子点

一方面作为运动方程方法的一个简单例子, 另一方面作为第六章输运问题的需要 (参见第六章第六节), 我们考虑一个有如下哈密顿的单能级量子点 (QD):

$$\hat{H} = \sum_{\sigma} \varepsilon_0 \hat{d}_\sigma^+ \hat{d}_\sigma + U \hat{n}_\uparrow \hat{n}_\downarrow \tag{5.6.31}$$

其中, $\sigma =\uparrow, \downarrow$; $\hat{n}_\sigma = \hat{d}_\sigma^+ \hat{d}_\sigma$ 是量子点中自旋为 σ 的电子数算符. 现在求该体系的格林函数 $g_{\sigma\sigma}$:

$$g_{\sigma\sigma}(t-t') \equiv \langle\langle \hat{d}_\sigma(t), \hat{d}_\sigma^+(t') \rangle\rangle_{\mathrm{C}} \equiv -\mathrm{i}\langle T \hat{d}_\sigma(t) \hat{d}_\sigma^+(t') \rangle \tag{5.6.32}$$

它的傅里叶变换为

$$g_{\sigma\sigma}(\omega) \equiv \langle\langle \hat{d}_\sigma; \hat{d}_\sigma^+ : \omega \rangle\rangle_{\mathrm{C}} \tag{5.6.33}$$

其运动方程为式 (5.6.7). 为此首先令 $\hat{A} = \hat{d}_\sigma$, $\hat{B} = \hat{d}_\sigma^+$, 则

$$[\hat{A}, \hat{B}]_+ = 1, \quad [\hat{A}, \hat{H}] = \varepsilon_0 \hat{d}_\sigma + U \hat{d}_\sigma \hat{n}_{\bar{\sigma}} \tag{5.6.34}$$

其中, $\bar{\sigma} \equiv -\sigma$, 代入式 (5.6.7) 得

$$\omega g_{\sigma\sigma}(\omega) = 1 + \varepsilon_0 g_{\sigma\sigma}(\omega) + U g^{(2)}(\omega) \tag{5.6.35}$$

其中

$$g^{(2)}(\omega) \equiv \langle\langle \hat{d}_\sigma \hat{n}_{\bar{\sigma}}; \hat{d}_\sigma^+ : \omega \rangle\rangle_{\mathrm{C}} \tag{5.6.36}$$

接下来要利用如下关系式:

$$[\hat{n}_{\bar{\sigma}}, \hat{H}] = 0, \quad \hat{n}_\sigma^2 = \hat{n}_\sigma$$

$$[\hat{d}_\sigma \hat{n}_{\bar{\sigma}}, \hat{d}_\sigma^+]_+ = [\hat{d}_\sigma, \hat{d}_\sigma^+]_+ \hat{n}_{\bar{\sigma}} - \hat{d}_\sigma [\hat{n}_{\bar{\sigma}}, \hat{d}_\sigma^+]_- = \hat{n}_{\bar{\sigma}} \tag{5.6.37}$$

重新取 $\hat{A}=\hat{d}_\sigma\hat{n}_{\bar{\sigma}}$, $\hat{B}=\hat{d}_\sigma^+$, 并再次代入式 (5.6.7) 得

$$(\omega-\varepsilon_0-U)g^{(2)}(\omega)=\langle\hat{n}_{\bar{\sigma}}\rangle\equiv n_{\bar{\sigma}} \tag{5.6.38}$$

所以耦合方程自然地截断, 而无需作任何近似. 我们的问题有精确解, 由此可以得出

$$\begin{aligned}g_{\sigma\sigma}(\omega)&=\frac{\omega-\varepsilon_0-U+Un_{\bar{\sigma}}}{(\omega-\varepsilon_0)(\omega-\varepsilon_0-U)}\\&=\frac{n_{\bar{\sigma}}}{\omega-\varepsilon_0-U}+\frac{1-n_{\bar{\sigma}}}{\omega-\varepsilon_0}\end{aligned} \tag{5.6.39}$$

方程 (5.6.39) 可以用来自洽地确定 $n_{\bar{\sigma}}$, 从而也能自洽地确定 $g_{\sigma\sigma}$. 在平衡时, 我们可以应用涨落–耗散定理 (参见式 (5.3.45)):

$$\langle\hat{n}_{\bar{\sigma}}\rangle=\langle\hat{d}_{\bar{\sigma}}^+(0)\hat{d}_{\bar{\sigma}}(0)\rangle=\int\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}(-2)\mathrm{Im}g_{\sigma\sigma}^{\mathrm{r}}(\omega)n_{\mathrm{F}}(\omega) \tag{5.6.40}$$

其中, $g_{\sigma\sigma}^{\mathrm{r}}(\omega)=g_{\sigma\sigma}(\omega+\mathrm{i}0^+)$.

第七节　关联函数的生成泛函

关联函数 (格林函数) 可以作为适当的生成泛函的泛函导数来得到, 这需要在生成泛函中引入外源场 $J_A(t)$, 它与算符 $\hat{A}$ 相耦合形成哈密顿中额外的外源项 $\hat{H}_J$.

$$\hat{H}_J=\sum_A J_A(t)\hat{A} \tag{5.7.1}$$

按 A 是玻色算符或费米算符, J_A 分别是对易量或反对易量 (Grassman 量)(参见附录 1A). 例如, 对于电子–声子体系, 有

$$\hat{H}_J=\sum_q\left[J_{b_q}(t)\hat{b}_q+J_{b_q^+}(t)\hat{b}_q^+\right]+\sum_k\left[J_{c_k}(t)\hat{c}_k+J_{c_k^+}(t)\hat{c}_k^+\right] \tag{5.7.2}$$

这样总哈密顿为

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}_{\mathrm{int}}+\hat{H}_J \tag{5.7.3}$$

一般的 n 点时序关联函数 $\left\langle T\prod\limits_{j=1}^n\hat{A}_j(t_j)\right\rangle$ 满足如下关系:

$$\left\langle T\prod_{j=1}^n\hat{A}_j(t_j)\right\rangle=\frac{\mathrm{i}^n}{Z[0]}\left.\frac{\delta^n Z[J]}{\delta J_{A_1}(t_1)\delta J_{A_2}(t_2)\cdots\delta J_{A_n}(t_n)}\right|_{J=0} \tag{5.7.4}$$

其中, $Z[J]$ 是有外源场 $J_A(t)$ 时的配分函数:

$$Z[J] = Z[0]\left\langle T\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_C \mathrm{d}t \sum\limits_B J_B(t)\hat{B}(t)}\right\rangle \tag{5.7.5}$$

式中, $Z[0]$ 是所有 J 为零时的配分函数, $Z[0]=\mathrm{tre}^{-\beta\hat{H}^{\mu}}$; $\hat{B}(t)=\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\varepsilon_{\mathrm{B}}t}\hat{B}$ 是海森伯绘景中的算符, 若 B 是消灭算符指数上取负, 产生算符则取正 (参见式 (1.3.12a)); C 是复时积分路径 (端点为 $t_-=0; t_+=-\mathrm{i}\beta$). 式 (5.7.4) 表明 $Z[J]$ 是 n 点时序关联函数 (或 n 点时序格林函数) 的生成泛函. 在接近局部平衡情况下, $Z[J]$ 描述了开放体系即非平衡体系的热力学, 并可用它的泛函导数来定义体系的 n 点时序关联函数.

可以证明, $Z[J]$ 还能进一步表述为

$$Z[J] = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_C \mathrm{d}tH_{\mathrm{int}}\left[\frac{\delta}{\delta J(t)}\right]}Z_0[J] \tag{5.7.6}$$

其中, $Z_0[J]$ 是有外源但无内部相互作用 ($\hat{H}_{\mathrm{int}}=0$) 时的配分函数, 且是如下高斯泛函:

$$Z_0[J] = Z_0[0]\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\int_C \mathrm{d}t_1\mathrm{d}t_2\sum\limits_{AB} J_A(t_1)\langle T\hat{A}_{\mathrm{I}}(t_1)\hat{B}_{\mathrm{I}}^{+}(t_2)\rangle_0 J_{B^+}(t_2)} \tag{5.7.7}$$

式中, $\hat{A}_{\mathrm{I}}(t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}_0 t}\hat{A}_t\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_0 t}$ 是相互作用绘景中的算符.

我们先证明式 (5.7.7). 对于自由粒子的粒子产生和消灭算符, 有如下一般性质.

(1)

$$\partial_t\hat{A} = -\mathrm{i}\varepsilon_A\hat{A}, \quad \partial_t A^+ = \mathrm{i}\varepsilon_A\hat{A}^+, \quad \varepsilon_A = \varepsilon_{A^+} \tag{5.7.8}$$

这只需要利用海森伯运动方程 $\partial_t A=\mathrm{i}[\hat{H}_0,\hat{A}]$ 以及 $\hat{H}_0$ 的表达式 (参见式 (1.3.61) 和式 (1.4.39)) 即可得知.

(2)

$$[\hat{A},\hat{B}^+]_{\mp} = \delta_{AB}, \quad [\hat{A},\hat{B}]_{\mp} = [\hat{A}^+,\hat{B}^+]_{\mp} = 0 \tag{5.7.9}$$

其中, 角标 $\mp$ 分别对应玻色子算符和费米子算符.

当忽略 $\hat{H}_{\mathrm{int}}$ 时, 由式 (5.7.5) 知有

$$Z_0[J] = Z_0[0]\langle S_J\rangle_0 \tag{5.7.10}$$

其中

$$S_J = T\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_C \mathrm{d}t\sum\limits_B J_B(t)\hat{B}_{\mathrm{I}}(t)} \tag{5.7.11}$$

根据前面广义 Wick 定理可知, $\langle S_J\rangle_0$ 可完全借助于自由传播子来表达. 而自由传播子取决于 $\hat{B}_{\mathrm{I}}(t)$ 对时间的依赖. 所以我们研究如下量对时间的导数:

$$\frac{1}{Z_0[0]}\frac{\mathrm{i}\delta Z_0[J]}{\delta J_A(t)} = \langle T\hat{A}_{\mathrm{I}}(t)S_J\rangle_0 \tag{5.7.12}$$

为了避免反对易量的复杂性, 上式中先乘以 $J_A(t)$, 来计算 $\dfrac{\partial}{\partial t}\langle TJ_A(t)\hat{A}_{\rm I}(t)S_J\rangle_0$. 计算时须将 S_J 展成幂级数以避免编时算符操作的复杂性. 设 $\hat{H}_{i\rm I}=J_{B_i}(t_i)\hat{B}_{i\rm I}(t_i)$, 其中, $t_i=t(\tau_i)$, 而 $t(\tau)$ 参数化积分路径为 C. 因

$$\begin{aligned}S_J&=\sum_{N=0}^{\infty}\frac{(-{\rm i})^N}{N!}\sum_{B_1B_2\cdots B_N}\int_C{\rm d}t_1{\rm d}t_2\cdots{\rm d}t_NT\hat{H}_{1\rm I}\hat{H}_{2\rm I}\cdots\hat{H}_{N\rm I}\\&=\sum_{N=0}^{\infty}\frac{(-{\rm i})^N}{N!}\sum_{B_1B_2\cdots B_N}\int_C{\rm d}t_1{\rm d}t_2\cdots{\rm d}t_N\sum_P\hat{H}_{i_1\rm I}\hat{H}_{i_2\rm I}\cdots\hat{H}_{i_N\rm I}\\&\quad\cdot\theta(\tau_{i_1}-\tau_{i_2})\theta(\tau_{i_2}-\tau_{i_3})\cdots\theta(\tau_{i_{N-1}}-\tau_{i_N})\end{aligned}\tag{5.7.13}$$

故

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\langle TJ_A(t)\hat{A}_{\rm I}(t)S_J\rangle_0=&\sum_{N=0}^{\infty}\frac{(-{\rm i})^N}{N!}\sum_{B_1B_2\cdots B_N}\int_C{\rm d}t_1{\rm d}t_2\cdots{\rm d}t_N\\&\cdot\sum_P\sum_{k=0}^{N}\frac{\partial}{\partial t}\Big\{\langle\hat{H}_{i_1\rm I}\cdots\hat{H}_{i_k\rm I}J_A(t)\hat{A}_{\rm I}(t)\hat{H}_{i_{k+1}\rm I}\cdots\hat{H}_{i_N\rm I}\rangle_0\\&\cdot\theta(\tau_{i_1}-\tau_{i_2})\cdots\theta(\tau_{i_k}-\tau)\theta(\tau-\tau_{i_{k+1}})\cdots\theta(\tau_{i_{N-1}}-\tau_{i_N})\Big\}\end{aligned}\tag{5.7.14}$$

注意到 $\dfrac{\partial}{\partial t}=\dfrac{1}{t'(\tau)}\dfrac{\partial}{\partial\tau}$ 以及 $\delta(\tau-\tau'){\rm d}\tau=\delta(t-t'){\rm d}t$, 在将式 (5.7.14) 右端 $\theta(\tau_{i_k}-\tau)\cdot\theta(\tau-\tau_{i_{k+1}})$ 求导后的两项重新组合后, 可得

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\langle TJ_A(t)\hat{A}_{\rm I}(t)S_J\rangle_0=&\left\langle T\left\{\frac{\partial}{\partial t}\left(J_A(t)\hat{A}_{\rm I}(t)\right)S_J\right\}\right\rangle_0\\&+\sum_{N=0}^{\infty}\frac{(-{\rm i})^N}{N!}\sum_{B_1B_2\cdots B_N}\int_C{\rm d}t_1{\rm d}t_2\cdots{\rm d}t_N\sum_P\sum_{k=1}^{N}\delta(t-t_{i_k})\\&\cdot\langle\hat{H}_{i_1\rm I}\cdots\hat{H}_{i_{k-1}\rm I}\Delta_{i_k}(t)\hat{H}_{i_{k+1}\rm I}\cdots\hat{H}_{i_N\rm I}\rangle_0\\&\cdot\theta(\tau_{i_1}-\tau_{i_2})\cdots\theta(\tau_{i_{N-1}}-\tau_{i_N})\end{aligned}\tag{5.7.15}$$

其中

$$\varDelta_i(t)=[J_A(t)\hat{A}_{\rm I}(t),J_{B_i}(t)\hat{B}_{i\rm I}(t)]=J_A(t)J_{B_i}(t)[\hat{A}_{\rm I}(t),\hat{B}_{i\rm I}(t)]_{\mp}\tag{5.7.16}$$

去掉 $J_A(t)$ 并将式 (5.7.15) 右端第二项写成编时乘积形式得

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle T\hat{A}_{\rm I}(t)S_J\rangle_0=\left\langle T\left\{\frac{\partial}{\partial t}\left(\hat{A}_{\rm I}(t)\right)S_J\right\}\right\rangle_0-{\rm i}\sum_BJ_B(t)\left\langle T\left\{\left[\hat{A}_{\rm I}(t),\hat{B}_{\rm I}(t)\right]_{\mp}S_J\right\}\right\rangle_0\tag{5.7.17}$$

利用式 (5.7.8) 和式 (5.7.9), 以及

$$\langle T\hat{A}_{\mathrm{I}}(t)S_J\rangle_0 = \frac{\mathrm{i}\delta \ln Z_0[J]}{\delta J_A(t)}\langle S_J\rangle \tag{5.7.18}$$

得

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \mathrm{i}\varepsilon_A\right]\frac{\mathrm{i}\delta \ln Z_0[J]}{\delta J_A(t)} = -\mathrm{i}J_{A^+}(t) \tag{5.7.19}$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} - \mathrm{i}\varepsilon_A\right]\frac{\mathrm{i}\delta \ln Z_0[J]}{\delta J_{A^+}(t)} = \pm\mathrm{i}J_A(t) \tag{5.7.20}$$

这些方程对源场 J 是线性的, 由此可见 $\ln Z_0[J]$ 不会比 J 的二次函数更复杂. 由于 $\langle \hat{A}_I(t)\rangle_0 = 0$, 不难得知

$$\left.\frac{-\delta^2 \ln Z_0[J]}{\delta J_A(t)\delta J_{B^+}(t')}\right|_{J=0} = \langle T\hat{A}_{\mathrm{I}}(t)\hat{B}_{\mathrm{I}}^+(t')\rangle_0 \tag{5.7.21}$$

其积分能得到所要求的二次式:

$$\ln Z_0[J] = -\frac{1}{2}\int_C \mathrm{d}t\mathrm{d}t'\sum_{AB} J_A(t)\langle T\hat{A}_{\mathrm{I}}(t)\hat{B}_{\mathrm{I}}^+(t')\rangle_0 J_{B^+}(t') + \mathrm{const} \tag{5.7.22}$$

上式直接给出式 (5.7.7). 对式 (5.7.19) 和式 (5.7.20) 再次求导, 将给出两点时序关联函数 (或两点时序格林函数) 所满足的正确的运动方程:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathrm{i}\varepsilon_A\right)\langle T\hat{A}_{\mathrm{I}}(t)\hat{B}_{\mathrm{I}}^+(t')\rangle_0 = \delta_{AB}\delta(t-t') \tag{5.7.23}$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - \mathrm{i}\varepsilon_A\right)\langle T\hat{A}_{\mathrm{I}}^+(t)\hat{B}_{\mathrm{I}}(t')\rangle_0 = \mp\delta_{AB}\delta(t-t') \tag{5.7.24}$$

由式 (5.7.7) 直接导出关于平均值的**广义 Wick 定理的泛函形式**:

$$\left\langle T\prod_{j=1}^{n}\hat{A}_j(t_j)\right\rangle_0 = \frac{\mathrm{i}^n}{Z_0[0]}\left.\frac{\delta^n Z_0[J]}{\delta J_{A_1}(t_1)\delta J_{A_2}(t_2)\cdots\delta J_{A_n}(t_n)}\right|_{J=0} \tag{5.7.25}$$

现在考虑包括 $\hat{H}_{\mathrm{int}}$ 的情形, 此时的配分函数为

$$Z[J] = Z[0]\left\langle T\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_C \mathrm{d}t\sum\limits_B J_B(t)\hat{B}(t)}\right\rangle = \mathrm{tr}\left[\mathrm{e}^{-\beta H^\mu}T\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_C \mathrm{d}t\sum\limits_B J_B(t)\hat{B}(t)}\right] \tag{5.7.26}$$

将关系式

$$T\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_C \mathrm{d}t\sum\limits_B J_B(t)\hat{B}(t)} = S(0,-\mathrm{i}\beta)T\left[S(-\mathrm{i}\beta,0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_C \mathrm{d}t\sum\limits_B J_B(t)\hat{B}_{\mathrm{I}}(t)}\right] \tag{5.7.27}$$

插入式 (5.7.26) 中. 再利用式 (2.2.14) 知

$$S(0,-\mathrm{i}\beta)=\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}_0^{\mu}}\mathrm{e}^{\beta\hat{H}^{\mu}} \tag{5.7.28}$$

以及

$$S(-\mathrm{i}\beta,0)=T\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_C \mathrm{d}t'\hat{H}_{\mathrm{intI}}(t')} \tag{5.7.29}$$

得

$$\begin{aligned}Z[J]&=\mathrm{tr}\left\{\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}_0^{\mu}}T\left[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_C \mathrm{d}t'\hat{H}_{\mathrm{intI}}(t')}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_C \mathrm{d}t\sum\limits_B J_B(t)\hat{B}_{\mathrm{I}}(t)}\right]\right\}\\&=Z_0[0]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_C \mathrm{d}t' H_{\mathrm{int}}\left[\frac{\delta}{\delta J(t')}\right]}\mathrm{tr}\left\{\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}_0^{\mu}}T\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_C \mathrm{d}t\sum\limits_B J_B(t)\hat{B}_{\mathrm{I}}(t)}\right\}\end{aligned} \tag{5.7.30}$$

其中, 上式推导中最后一步是由于 H_{int} 是算符 B 的多项式. 又由于最后等式中的迹正好是 $Z_0[J]$, 故利用式 (5.7.7) 即可得出式 (5.7.6), 进而由它可以生成任意 n 点关联函数的费曼图.

现在来看几个重要特例, 由式 (5.7.6) 和式 (5.7.7) 知

$$\frac{Z_0[J]}{Z_0[0]}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_C \mathrm{d}tH_{\mathrm{int}}\left[\frac{\delta}{\delta J(t)}\right]}\left.\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\int_C \mathrm{d}t_1\mathrm{d}t_2\sum\limits_{AB}J_A(t_1)\langle T\hat{A}_{\mathrm{I}}(t_1)\hat{B}_{\mathrm{I}}^{+}(t_2)\rangle_0 J_{B^+}(t_2)}\right|_{J=0} \tag{5.7.31}$$

显然, 它将给出所有连通和不连通的闭合图.

对于两点时序关联函数, 有

$$\begin{aligned}\langle T\hat{A}(t)\hat{B}^{+}(t')\rangle&=\frac{\mathrm{i}^2}{Z[0]}\left.\frac{\delta^2 Z[J]}{\delta J_A(t)\delta J_{B^+}(t')}\right|_{J=0}\\&=-\frac{Z_0[0]}{Z[0]}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_C \mathrm{d}tH_{\mathrm{int}}\left[\frac{\delta}{\delta J(t)}\right]}\left.\varPhi[J]\right|_{J=0}\end{aligned} \tag{5.7.32}$$

其中

$$\varPhi[J]=\frac{\delta^2}{\delta J_A(t)\delta J_{B^+}(t')}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\int_C \mathrm{d}t_1\mathrm{d}t_2\sum\limits_{XY}J_X(t_1)\langle T\hat{X}_{\mathrm{I}}(t_1)\hat{Y}_{\mathrm{I}}^{+}(t_2)\rangle_0 J_{Y^+}(t_2)} \tag{5.7.33}$$

对于费米子情形, 上式中的求导应分别理解成左导数和右导数 (参见附录 1A). 因 J 是经典数 (包括 Grassman 量), 在考虑符号情形下可以移动:

$$J_X(t_1)\langle T\hat{X}_{\mathrm{I}}(t_1)\hat{Y}_{\mathrm{I}}^{+}(t_2)\rangle_0 J_{Y^+}(t_2)=J_{Y^+}(t_2)\langle T\hat{Y}_{\mathrm{I}}^{+}(t_2)\hat{X}_{\mathrm{I}}(t_1)\rangle_0 J_X(t_1)$$

故

$$\varPhi[J]=-\frac{\delta}{\delta J_A(t)}$$

$$
\begin{aligned}
&\cdot\left\{\int_C \mathrm{d}t_1 \sum_X J_X \langle T\hat{X}_\mathrm{I}(t_1)\hat{B}_\mathrm{I}^+(t_2)\rangle_0 \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\int_C \mathrm{d}t_3\mathrm{d}t_4 \sum\limits_{UY} J_U(t_3)\langle T\hat{U}_\mathrm{I}(t_3)\hat{Y}_\mathrm{I}^+(t_4)\rangle_0 J_{Y^+}(t_4)}\right\}\\
=&\Big[-\langle T\hat{A}_I(t)\hat{B}_I^+(t')\rangle_0\\
&+\int_C \mathrm{d}t_1\mathrm{d}t_2 \sum_{XY} J_X(t_1)\langle T\hat{X}_\mathrm{I}(t_1)\hat{B}_\mathrm{I}^+(t')\rangle_0 J_{Y^+}(t_2)\ \langle T\hat{A}_\mathrm{I}(t)\hat{Y}_\mathrm{I}^+(t_2)\rangle_0\Big]\\
&\cdot \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\int_C \mathrm{d}t_3\mathrm{d}t_4 \sum\limits_{UV} J_U(t_3)\langle T\hat{U}_\mathrm{I}(t_3)\hat{V}_\mathrm{I}^+(t_4)\rangle_0 J_{V^+}(t_4)}
\end{aligned}
\tag{5.7.34}
$$

注意由式 (3.1.18) 以及 $t=-\mathrm{i}\tau$ 知

$$
\frac{Z[0]}{Z_0[0]}=\langle S(-\mathrm{i}\beta,0)\rangle_0 \tag{5.7.35}
$$

将式 (5.7.34) 代入式 (5.7.32) 并利用式 (5.7.31) 得

$$
\begin{aligned}
\langle T\hat{A}(t)\hat{B}^+(t')\rangle =&\langle T\hat{A}_\mathrm{I}(t)\hat{B}_\mathrm{I}^+(t')\rangle_0-\frac{1}{\langle S(-\mathrm{i}\beta,0)\rangle_0}\\
&\cdot\int_C \mathrm{d}t_1\mathrm{d}t_2\sum_{XY}\langle T\hat{X}_\mathrm{I}(t_1)\hat{B}_\mathrm{I}^+(t')\rangle_0\langle T\hat{A}_\mathrm{I}(t)\hat{Y}_\mathrm{I}^+(t_2)\rangle_0\\
&\cdot \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_C \mathrm{d}t'' H_\mathrm{int}\left[\frac{\delta}{\delta J(t'')}\right]}\\
&\cdot\left\{J_{Y^+}(t_2)J_X(t_1)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\int_C \mathrm{d}t_3\mathrm{d}t_4\sum\limits_{UV}J_U(t_3)\langle T\hat{U}_\mathrm{I}(t_3)\hat{V}_\mathrm{I}^+(t_4)\rangle_0 J_{V^+}(t_4)}\right\}\Bigg|_{J=0}
\end{aligned}
\tag{5.7.36}
$$

其中, 右端分母中 $\langle S(-\mathrm{i}\beta,0)\rangle_0$ 将消去分子中的所有不连通图. 借助于正规自能, 式 (5.7.36) 可写成

$$
\begin{aligned}
\langle T\hat{A}(t)\hat{B}^+(t')\rangle =&\langle T\hat{A}_\mathrm{I}(t)\hat{B}_\mathrm{I}^+(t')\rangle_0+\int_C \mathrm{d}t_1\mathrm{d}t_2\sum_{XY}\langle T\hat{A}_\mathrm{I}(t)\hat{Y}_\mathrm{I}^+(t_1)\rangle_0\\
&\cdot \Sigma_{Y^+X}(t_1,t_2)\langle T\hat{X}_\mathrm{I}(t_2)\hat{B}_\mathrm{I}^+(t')\rangle_0\\
&+\text{单粒子可约项}
\end{aligned}
\tag{5.7.37}
$$

式中

$$
\begin{aligned}
&\Sigma_{Y^+X}(t_1,t_2)\\
=&-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_C \mathrm{d}t'' H_\mathrm{int}\left[\frac{\delta}{\delta J(t'')}\right]}\\
&\cdot\left\{J_{Y^+}(t_2)J_X(t_1)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\int_C \mathrm{d}t_3\mathrm{d}t_4\sum\limits_{UV}J_U(t_3)\langle T\hat{U}_\mathrm{I}(t_3)\hat{V}_\mathrm{I}^+(t_4)\rangle_0 J_{V^+}(t_4)}\right\}\Bigg|_{J=0,\mathrm{cp},1i}
\end{aligned}
\tag{5.7.38}
$$

其中, 角标 cp 和 $1i$ 分别代表连通部分和单粒子不可约部分.

以上我们可以看出配分函数只是这样的生成泛函, 由它生成的关联函数并不是连通的关联函数, 相应的费曼图是由不连通图和连通图共同组成的. 然而配分函数的对数 $\ln Z[J]$ 却能成为连通关联函数的生成泛函. 这可以再次利用第二章中的连通图定理的证明所采用的复制技术 (replica technique) 来加以证明. 事实上, 由泛函 $(Z[J])^m$ 的泛函导数所得的关联函数图形将具有这样的性质, 所有连通图将正比于 m 且所有不连通图将至少含有两个 m 的因子, 可以通过

$$W[J]=\lim_{m\to 0}\frac{\partial}{\partial m}(Z[J])^m$$

来挑选出正比于 m 的项 (参见式 (2.6.8)), 从而使得

$$W[J]=\ln Z[J] \tag{5.7.39}$$

成为连通图的生成泛函.

附录 5A 托马斯–费米模型

对于一个处于平衡的固体, 局域电子密度由费米能级确定. 如果我们对体系施加一个局域的静电势 $V_0(\underline{x})$, 则粒子将发生迁移直到产生一个与费米能级一致的新的平衡. 除了外部施加的电势外, 还有电荷移动造成的感应电荷密度 $\rho_{\text{ind}}(\underline{x})$ 所产生的电势 $V(\underline{x})$. 它满足方程

$$\boldsymbol{\nabla}^2 V(\underline{x})=4\pi\rho_{\text{ind}}(\underline{x}) \tag{5A.1}$$

因此粒子所感受到的总电势为

$$V_{\text{eff}}(\underline{x})=V_0(\underline{x})+V(\underline{x}) \tag{5A.2}$$

而粒子的能量将由原来的 ε_λ 改变成 $\varepsilon_\lambda-eV_{\text{eff}}(\underline{x})$(其中, λ 表征粒子所处的状态), 原来的分布函数 $n_{\text{F}}(\varepsilon)$ 变成

$$n_{\text{eff}}(\varepsilon)=n_{\text{F}}\left[\varepsilon-eV_{\text{eff}}(\underline{x})\right] \tag{5A.3}$$

其中, 都有相同的的化学势 μ, 这是因为在平衡时, 电子气的化学势是一个常数, 与位置 $\underline{x}$ 无关. 所以

$$\begin{aligned}\rho_{\text{ind}}(\underline{x})&=-\frac{1}{V}\sum_\lambda\left[n_{\text{eff}}(\varepsilon_\lambda)-n_{\text{F}}(\varepsilon_\lambda)\right]=-N(\mu)\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\varepsilon\big[n_{\text{eff}}(\varepsilon)-n_{\text{F}}(\varepsilon)\big]\\&=-N(\mu)\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\varepsilon\left\{n_{\text{F}}[\varepsilon-eV_{\text{eff}}(\underline{x})]-n_{\text{F}}(\varepsilon)\right\}\end{aligned}$$

$$\approx N(\mu)\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\varepsilon\frac{\partial n_{\mathrm{F}}(\varepsilon)}{\partial\varepsilon}eV_{\mathrm{eff}}(\underline{x})$$

其中, V 是体积; $N(\mu)$ 是费米能级处的态密度. 再利用 $\dfrac{\partial n_{\mathrm{F}}(\varepsilon)}{\partial\varepsilon}\approx-\delta(\varepsilon-\mu)$, 可得

$$\rho_{\mathrm{ind}}(\underline{x})=-eN(\mu)V_{\mathrm{eff}}(\underline{x}) \tag{5A.4}$$

代入式 (5A.1), 得

$$\boldsymbol{\nabla}^2V(\underline{x})=-4\pi eN(\mu)V_{\mathrm{eff}}(\underline{x}) \tag{5A.5}$$

即

$$\left[\boldsymbol{\nabla}^2+4\pi eN(\mu)\right]V_{\mathrm{eff}}(\underline{x})=\boldsymbol{\nabla}^2V_0(\underline{x}) \tag{5A.6}$$

这就是非齐次的托马斯–费米方程. 对式 (5A.6) 作傅里叶变换得

$$\left[-\underline{q}^2+4\pi eN(\mu)\right]V_{\mathrm{eff}}(\underline{q})=-\underline{q}^2V_0(\underline{q})$$

所以

$$V_{\mathrm{eff}}(\underline{q})=\frac{V_0(\underline{q})}{1-4\pi eN(\mu)/\underline{q}^2} \tag{5A.7}$$

即

$$\varepsilon(\underline{q})=1-\frac{4\pi eN(\mu)}{\underline{q}^2} \tag{5A.8}$$

从而式 (5.5.8) 成立.

第六章　电荷及自旋输运

第一节　引　　论

在导体中, 电流的衰减有两个基本来源:

(1) 无序的存在.

(2) 相互作用的存在. 例如, 电子与声子的相互作用、电子之间的相互作用.

在理想晶体中, 不存在耗散, 故电导为无穷大. 然而当存在无序时, 它会破坏晶体的平移不变性并引起耗散. 无序的量度是熵, 熵的产生是耗散的量度. 描述相关电阻的输运现象是与熵和熵产生的概念直接相联系的. 固体中的无序有许多不同的样式. 从熵的观点来看, 最小的无序大概是理想晶体中的一个单杂质或一个无公度激发波等. 但通过 Anderson 和 Mott 的工作可知, 无序也许是如此重要以致产生**弱局域化**或**金属–绝缘相变**. 这两者均是我们以后要讨论的对象.

长期以来, 对金属中的电子和绝缘体中的声子的输运性质的传统处理方法是以玻尔兹曼方程为基础的运动学 (kinetics) 途径. 但该方程是对正则变量 $\underline{x}, \underline{p}$ 的相空间中的单粒子分布函数 $f(\underline{x}, \underline{p}, t)$ 所建立的方程, 显然这个对象是经典的, 因为在量子力学中, $\underline{x}, \underline{p}$ 是满足测不准关系的非对易算符, 它们不能同时准确测量. 因此这个概念上的困难必然会限制方程的应用条件. 事实上, 当时间、空间标度很小时, 必须用量子运动学 (参见第四章) 来替代玻尔兹曼运动学. 除了运动学途径, 对于电子存在另一种 Landauer 途径, 它利用了反射与透射振幅和粒子库. 该途径中的多端 Landauer-Büttiker 形式体系已成为一种分析介观输运的标准途径, 介观输运涵盖了从量子点 (QD) 接触到量子霍尔效应及自旋相关隧穿输运的宽阔领域.

输运现象中, 当电子激发的量子相干变得重要时, 我们需要非平衡现象的 “量子理论”. 第四章的非平衡格林函数方法已为我们提供了这样一种工具. 输运现象的最简单微观描述是前面介绍的线性响应理论, 以此建立的电导的 Kubo 公式, 正是我们在本章中将要加以讨论的. 但这种描述仅在接近平衡时才成立, 其中熵产生可被忽略.

随着半导体科学及微技术的迅猛发展, 各种低维介观结构得以实现. 在这些体系中, 自旋在一些性能上比电荷更优越, 如低能耗、退相干时间长等. 由此研究自旋的输运性质、利用自旋自由度来设计电子器件等形成了新的研究方向. 在晶体中, 还存在着自旋轨道 (SO) 耦合作用 (SO 互作用). SO 互作用是作为对电子所满足的

薛定谔方程的相对论修正而出现的, 它是狄拉克相对论性电子理论的必然结果. 在晶体中有几种典型的 SO 耦合, 其中一种是所谓的**Rashba 耦合**, 它是由结构反演不对称性而产生的. 当材料具有中心反演不对称性 (或体反演不对称性) 时, 会出现所谓的**Dresselhaus 耦合**. 在自旋输运中, SO 起重要作用.

在各种输运现象的研究中, 需要了解外场 $F(\underline{x},t)$ 对粒子 $j(j=1,2,\cdots,N)$ 的某种可观测量 $\hat{O}_j$ 的作用. 与 $\hat{O}_j$ 相对应的密度为

$$\hat{\rho}_O(\underline{x})=\sum_{j=1}^{N}\frac{1}{2}\left[\delta(\underline{x}-\underline{x}_j),\hat{O}_j\right]_+ \tag{6.1.1}$$

其中, 反对易子的引入是考虑到 $\hat{O}_j$ 有与 $\underline{x}_j$ 不对易的可能情形. 该密度算符的傅里叶变换为

$$\hat{\rho}_O(\underline{q})=\int_V \mathrm{d}^3x\hat{\rho}_O(\underline{x})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\underline{q}\cdot\underline{x}}=\sum_{j=1}^{N}\frac{1}{2}\left[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\underline{q}\cdot\underline{x}_j},\hat{O}_j\right]_+ \tag{6.1.2}$$

设外场 $F(\underline{x},t)$ 也有对应的傅里叶分量 $F(\underline{q},t)$:

$$F(\underline{x},t)=\frac{1}{V}\sum_{\underline{q}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{q}\cdot\underline{x}}F(\underline{q},t) \tag{6.1.3}$$

其中, V 是体积. 外场对可观测量的作用由如下哈密顿来描述:

$$\hat{H}_{1t}=\sum_{j=1}^{N}\frac{1}{2}\left[F(\underline{x}_j,t),\hat{O}_j\right]_+ \tag{6.1.4}$$

则由式 (6.1.1)~ 式 (6.1.3) 知

$$\hat{H}_{1t}=\int_V \mathrm{d}^3xF(\underline{x},t)\hat{\rho}_O(\underline{x})=\frac{1}{V}\sum_{\underline{q}}F(\underline{q},t)\hat{\rho}_O(-\underline{q}) \tag{6.1.5}$$

表 6.1.1 给出了有关电子密度的几个重要的例子.

表 6.1.1 几种常见的密度与外场

$\hat{O}_j$	$\hat{\rho}_o(\underline{q})$	$F(\underline{x},t)$
$-\mathrm{e}$	$\hat{\rho}(\underline{q})=-e\hat{n}(\underline{q})=-e\sum_j \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\underline{q}\cdot\underline{x}_j}$ 电荷密度	$\varphi(\underline{x},t)$ 标势
$\frac{(-e)}{m}\hat{\underline{p}}_j$	$\hat{\underline{j}}(\underline{q})=\sum_j\frac{-e}{2m}\left[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\underline{q}\cdot\underline{x}_j},\hat{\underline{p}}_j\right]_+$ 电流密度	$\underline{A}(\underline{x},t)$ 矢势
$\frac{\hat{\underline{\sigma}}_j}{2}$	$\hat{\underline{S}}(\underline{q})=\sum_j\frac{\hat{\underline{\sigma}}_j}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\underline{q}\cdot\underline{x}_j}$ 自旋密度	$g\mu_{\mathrm{B}}H(\underline{x},t)$ 磁场

表 6.1.1 中, $\underline{\hat{\sigma}}_j$ 是泡利算符, 为方便我们也引入升降算符 $\hat{\sigma}^{\pm}$:

$$\hat{\sigma}^{+} \equiv \frac{1}{2}(\hat{\sigma}^{x} + \mathrm{i}\hat{\sigma}^{y}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}^{-} \equiv \frac{1}{2}(\hat{\sigma}^{x} - \mathrm{i}\hat{\sigma}^{y}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{6.1.6}$$

对电子 $g \approx 2$, μ_{B} 是玻尔磁子. 密度算符的二次量子化表示为

电荷密度:

$$\hat{\rho}(\underline{q}) = -\mathrm{e}\sum_{\underline{p},\sigma} \hat{c}^{+}_{\underline{p}\sigma}\hat{c}_{\underline{p}+\underline{q},\sigma} \tag{6.1.7}$$

电流密度:

$$\underline{\hat{j}}(\underline{q}) = \frac{-e}{m}\sum_{\underline{p},\sigma}\left[\underline{p} + \frac{\underline{q}}{2}\right]\hat{c}^{+}_{\underline{p}\sigma}\hat{c}_{\underline{p}+\underline{q},\sigma} \tag{6.1.8}$$

自旋密度:

$$\hat{S}_z(\underline{q}) = \frac{1}{2}\sum_{\underline{p},\sigma}\sigma\hat{c}^{+}_{\underline{p}\sigma}\hat{c}_{\underline{p}+\underline{q},\sigma} \tag{6.1.9}$$

$$\hat{S}_{\pm}(\underline{q}) = \frac{1}{2}\sum_{\underline{p}}\hat{c}^{+}_{\underline{p}\pm}\hat{c}_{\underline{p}+\underline{q},\mp} \tag{6.1.10}$$

第二节　Kubo 公式

一、公式的建立

电导的 Kubo 公式实际上是电导的线性响应理论. 考虑一较弱的外加电场施加于固体, 现在计算该体系的电导. 设固体中的总电场为

$$\underline{E}(\underline{q},t) = \underline{\varepsilon}(\underline{q},\omega)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \tag{6.2.1}$$

因

$$i_a(\underline{q},t) = i_a(\underline{q},\omega)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} = \sigma_{ab}\underline{E}_b(\underline{q},t) = \sigma_{ab}\varepsilon_b(\underline{q},\omega)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}$$

所以电导率 σ 满足

$$i_a(\underline{q},\omega) = \sigma_{ab}(\underline{q},\omega)\varepsilon_b(\underline{q},\omega) \tag{6.2.2}$$

其中, $a,b = x,y,z$, 且重复指标自动求和; $\underline{i}$ 是施加外场后所测量到的电流密度矢量.

由于规范选择的任意性, 取 $\underline{A}$ 规范 (即 $\phi = 0, \underline{A} \neq 0$), 由于 $\underline{E} = -\dfrac{\partial \underline{A}}{\partial t}$(仍用自然单位), 注意到 $\mathrm{i}\dfrac{\partial}{\partial t} \to \omega$, 故有

$$\varphi = 0, \quad \underline{A} = -\mathrm{i}\frac{1}{\omega}E \tag{6.2.3}$$

体系的哈密顿为

$$\hat{H}_t = \sum_i \frac{1}{2m}(\underline{\hat{p}}_i + e\underline{\hat{A}})^2 + \hat{H}_{\text{int}}$$
$$= \hat{H} + \hat{H}_{1t} \tag{6.2.4}$$

其中, $\hat{H}$ 是无外场时体系的哈密顿, 它包含了体系中各种可能的相互作用 (用 $\hat{H}_{\text{int}}$ 表示); $\hat{H}_{1t}$ 是由外电场所引起的哈密顿的附加项. 在 $\underline{A}$ 的一阶近似下, 哈密顿的附加项 $\hat{H}_{1t}$ 为

$$\hat{H}_{1t} = -\sum_{ja} \frac{1}{2}\left[\hat{A}_a(\underline{x}_j, t), \frac{(-e)\hat{p}_{ja}}{m}\right]_+$$

其中, $a = x, y, z$. 由式 (6.1.4) 和式 (6.1.5) 知

$$\hat{H}_{1t} = -\frac{1}{V}\sum_{\underline{q}} \underline{\hat{A}}(\underline{q}, t) \cdot \underline{\hat{j}}(-\underline{q}) \tag{6.2.5}$$

由于粒子的动力学速度为

$$\underline{\hat{v}}_{jt} = \frac{\underline{\hat{p}}_j + e\underline{\hat{A}}(\underline{x}_j, t)}{m} \tag{6.2.6}$$

它的两端同乘以 $\sum\limits_j \dfrac{-e}{2}\left[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\underline{q}\cdot\underline{x}_j},\ \right]_+$, 并利用式 (6.1.3) 可得

$$\underline{\hat{j}}_t(\underline{q}) = \underline{\hat{j}}(\underline{q}) - \frac{e^2}{mV}\sum_{\underline{q}'} \underline{\hat{A}}(\underline{q}', t)\hat{n}(\underline{q} - \underline{q}') \tag{6.2.7}$$

其中, $\hat{n}(\underline{q} - \underline{q}') = \sum\limits_j \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\underline{q}-\underline{q}')\cdot\underline{x}_j} = N\delta_{\underline{q}\underline{q}'}$. 故利用线性响应理论基本公式 (5.1.17), 可得到它的平均值为

$$\langle \hat{j}_{ta}(\underline{q})\rangle_t = \langle \hat{j}_a(\underline{q})\rangle_t - \frac{e^2 n}{m}A_a(\underline{q}, t)$$
$$= -\frac{e^2 n}{m}A_a(\underline{q}, t)$$
$$+ \frac{\mathrm{i}}{V}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t'\theta(t - t')\left\langle\left[\hat{j}_a(\underline{q}, t), \hat{j}_b(-\underline{q}, t')\right]\right\rangle A_b(\underline{q}, t') \tag{6.2.8}$$

注意: 式 (6.2.8) 的推导中利用了如下两点事实: ① 平衡时的平均值 $\langle \hat{j}_a(\underline{q})\rangle = 0$; ② 由式 (6.2.1) 知道外加电场只与 $\underline{q}$ 有关, 即 $A(\underline{q}', t) = \delta_{\underline{q}'\underline{q}}A(\underline{q}, t)$.

按 Fritz London 的说法, 式 (6.2.8) 最后等式右边第一项对应了电流的抗磁部分, 而第二项对应了顺磁部分. 再将 $\underline{A} = \dfrac{-\mathrm{i}}{\omega}\underline{E}$ 以及 $\langle \hat{j}_{ta}(\underline{q})\rangle_t = i_a(\underline{q}, \omega)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}$ 代入, 并利用式 (6.2.1) 和式 (6.2.2) 得

$$\sigma_{ab}(\underline{q}, \omega) = \frac{\mathrm{i}e^2 n}{m\omega}\delta_{ab} + \frac{1}{\omega V}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t'\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega(t-t')}\theta(t - t')\left\langle\left[\hat{j}_a(\underline{q}, t), \hat{j}_b(-\underline{q}, t')\right]\right\rangle \tag{6.2.9}$$

这是所谓的**Kubo 公式**. 按照前面对推迟响应函数符号的约定, 有

$$\chi^{\mathrm{r}}_{ab}(\underline{q},t-t') \equiv \langle\langle \hat{j}_a(\underline{q},t),\hat{j}_b(-\underline{q},t')\rangle\rangle_{\mathrm{r}} \equiv -\mathrm{i}\theta(t-t')\langle[\hat{j}_a(\underline{q},t),\hat{j}_b(-\underline{q},t')]\rangle \tag{6.2.10}$$

它的傅里叶变换记为

$$\chi^{\mathrm{r}}_{ab}(\underline{q},\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}(t-t')\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega(t-t')}\chi^{\mathrm{r}}_{ab}(\underline{q},t-t') \tag{6.2.11}$$

则 Kubo 公式可简记为

$$\sigma_{ab}(\underline{q},\omega) = \frac{\mathrm{i}}{\omega}\left[\frac{e^2 n}{m}\delta_{ab} + \frac{1}{V}\chi^{\mathrm{r}}_{ab}(\underline{q},\omega)\right] \tag{6.2.12}$$

Kubo 公式 (6.2.9) 或式 (6.2.12) 对于零温或有限温度都是正确的. 只不过在零温时 $\langle\cdots\rangle$ 是对基态求平均, 而在有限温度时是对热分布求统计平均. 在有限温度时, 也可采用松原形式体系. 事实上, 电导的实际计算依赖于我们用虚时关联函数来提取这个量的能力. 首先定义如下的**流−流虚时关联函数**:

$$\chi_{ab}(\underline{q},\tau-\tau') \equiv -\langle T_\tau j_a(\underline{q},\tau) j_b(-\underline{q},\tau')\rangle \tag{6.2.13}$$

$$\chi_{ab}(\underline{q},\mathrm{i}\omega_n) = \int_0^{\beta} \mathrm{d}\tau \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n\tau}\chi^{\tau}_{ab}(\underline{q},\tau) \tag{6.2.14}$$

一旦求出了虚时关联函数, 则可通过解析延拓方法来得到所需的推迟响应函数 $\chi^{\mathrm{r}}_{ab}(\underline{q},\omega)$:

$$\chi_{ab}(\underline{q},\mathrm{i}\omega_n) \xrightarrow{\mathrm{i}\omega_n\to\omega+\mathrm{i}0^+} \chi^{\mathrm{r}}_{ab}(\underline{q},\omega) \equiv \chi_{ab}(\underline{q},\omega+\mathrm{i}0^+) \tag{6.2.15}$$

然后再利用式 (6.2.12) 求出电导.

文献中 Kubo 公式的另一种常见的等价形式为

$$\sigma_{ab}(\underline{q},\omega) = \frac{1}{V}\int_0^{\infty}\mathrm{d}t\int_0^{\beta}\mathrm{d}\tau\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\langle \hat{j}_a(\underline{q},t-\mathrm{i}\tau)\hat{j}_b(-\underline{q},0)\rangle \tag{6.2.16}$$

证明 令

$$\tilde{j}_a(\underline{q},t) = \frac{1}{\beta}\int_0^{\beta}\mathrm{d}\tau\hat{j}_a(\underline{q},t-\mathrm{i}\tau)$$

由迹的循环对称性可得

$$\left\langle\left[\hat{j}_a(\underline{q},t),\hat{j}_b(-\underline{q},t')\right]\right\rangle = \mathrm{tr}\left(\left[\hat{\rho},\hat{j}_a(\underline{q},t)\right]\hat{j}_b(-\underline{q},t')\right)$$

又因

$$\left[\hat{\rho},\hat{j}_a(\underline{q},t)\right] = \mathrm{i}\beta\hat{\rho}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\tilde{j}_a(\underline{q},t) \tag{6.2.17}$$

事实上, 则

$$\begin{aligned}
\mathrm{i}\beta\hat{\rho}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\tilde{j}_a(\underline{q},t) &= \mathrm{i}\hat{\rho}\int_0^{\beta}\mathrm{d}\tau\frac{\mathrm{d}}{-\mathrm{id}\tau}\hat{j}_a(\underline{q},t-\mathrm{i}\tau) \\
&= \hat{\rho}\hat{j}_a(\underline{q},t) - \hat{\rho}\hat{j}_a(\underline{q},t-i\beta) \\
&= \hat{\rho}\hat{j}_a(\underline{q},t) - e^{\beta(\Omega-\hat{H}^{\mu})}e^{i\hat{H}^{\mu}(t-i\beta)}\hat{j}_a e^{-i\hat{H}^{\mu}(t-i\beta)} \\
&= \hat{\rho}\hat{j}_a(\underline{q},t) - \hat{j}_a(\underline{q},t)\hat{\rho}
\end{aligned}$$

故式 (6.2.17) 成立. 这样

$$\left\langle\left[\hat{j}_a(\underline{q},t),\hat{j}_b(-\underline{q},t')\right]\right\rangle = \mathrm{i}\beta\left\langle\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\tilde{j}_a(\underline{q},t)\right)\hat{j}_b(-q,t')\right\rangle \tag{6.2.18}$$

将式 (6.2.18) 代入式 (6.2.9), 并利用分部积分法 (注意: 关联函数和被积表达式是 $t-t'$ 的函数, 因而在积分号内可作替换 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\to-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t'}$), 则式 (6.2.9) 右边第二项的积分成为

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{\omega V}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t'\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega(t-t')}\theta(t-t')\mathrm{i}\beta\left\langle\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\tilde{j}_a(\underline{q},t)\right)\hat{j}_b(-\underline{q},t')\right\rangle \\
=&\frac{-\mathrm{i}\beta}{\omega V}\langle\tilde{j}_a(\underline{q},t)\hat{j}_b(-\underline{q},t)\rangle \\
&+\frac{\beta}{V}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t'\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega(t-t')}\theta(t-t')\langle\tilde{j}_a(\underline{q},t)\hat{j}_b(-\underline{q},t')\rangle
\end{aligned} \tag{6.2.19}$$

式 (6.2.19) 右边第一项中可以利用平移不变性 (5.1.14), 得

$$\frac{-\mathrm{i}\beta}{\omega V}\langle\tilde{j}_a(\underline{q},t)\hat{j}_b(-\underline{q},t)\rangle = \frac{-\mathrm{i}\beta}{\omega V}\langle\tilde{j}_a(\underline{q})\hat{j}_b(-\underline{q})\rangle \tag{6.2.20}$$

进一步可证明 (参见**附录 6A**)

$$\langle\tilde{j}_a(\underline{q})\hat{j}_b(-\underline{q})\rangle = \frac{V}{\beta}\frac{ne^2}{m}\delta_{ab} \tag{6.2.21}$$

由此可知, 式 (6.2.19) 中右边第一项将消去式 (6.2.9) 中右边第一项 (即抗磁响应项), 从而得到式 (6.2.16).

如果外场是仅与时间有关的均匀场, 则其电导可通过取 $\underline{q}\to 0$ 的极限从前面的公式中得到:

$$\sigma_{ab}(\omega) = \frac{1}{V}\int_0^{\infty}\mathrm{d}t\int_0^{\beta}\mathrm{d}\tau\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\langle\hat{j}_a(t-\mathrm{i}\tau)\hat{j}_b(0)\rangle \tag{6.2.22}$$

当外场是不随时间变化的均匀场, 则得到直流电导, 它是实的. 可先取 $\underline{q}\to 0$ 的极限, 后取 $\omega\to 0$ 的极限来得到, 注意这个取的次序是重要的. 事实上, 极限 $\omega\to 0$,

$\underline{q} \neq 0$ 描述了一个静电场, 它在空间上是周期的, 这里电荷将寻求一个新的平衡, 在平衡后将无电流. 故通常要先取 $\underline{q} \to 0$, 因为电流算符在这个极限下有意义, 进而关联函数也有好的行为. 事实上, 若是仅需计算直流电导, 那么从一开始就可取 $\underline{q} = 0$. 这样, 有

$$\mathrm{Re}(\sigma_{ab}) = \frac{1}{V}\int_0^{\infty}\mathrm{d}t\int_0^{\beta}\mathrm{d}\tau \mathrm{e}^{-\eta t}\langle \hat{j}_a(t-\mathrm{i}\tau)\hat{j}_b(0)\rangle \tag{6.2.23}$$

其中, $\eta \to 0^+$. 前面的与频率有关的电导公式对于 $\mathrm{Im}\omega > 0$ 成立 (它保证积分的收敛性). 当 $\omega \to 0$ 时, 我们保留一个因子 $\mathrm{e}^{-\eta t}$, 这个因子也可从线性响应公式 (5.1.15) 中看到.

二、光电导

下面我们讨论仅与频率有关的电导 (或光电导). 在实际情形中, 由于光的高速度意味着 $|\underline{q}| = \omega/c \ll p_{\mathrm{F}}$, 所以在电子输运中, 可以考虑取极限 $\underline{q} \to 0$, 这样有 $\sigma(\omega) = \sigma(\underline{q} = 0, \omega)$. 若进一步取 $\omega \to 0$, 则将得到直流 (DC) 电导:

$$\sigma_{\mathrm{DC}} = \lim_{\omega \to 0}\sigma(\omega)$$

注意在正常导体中, σ_{DC} 是有限的. 故由式 (6.2.12) 看出

$$\frac{e^2 n}{m}\delta_{ab} = \frac{-1}{V}\chi^{\mathrm{r}}_{ab}(\underline{0}, 0) \tag{6.2.24}$$

所以对于光电导, 有

$$\sigma_{ab}(\omega) = \frac{\mathrm{i}}{\omega V}\left[\chi^{\mathrm{r}}_{ab}(\omega) - \chi^{\mathrm{r}}_{ab}(0)\right]$$

或

$$\sigma_{ab}(\omega) = \frac{\mathrm{i}}{\omega V}\left[\chi_{ab}(\omega + \mathrm{i}0^+) - \chi_{ab}(\mathrm{i}0^+)\right] \tag{6.2.25}$$

第三节　被无规杂质散射的电导

一、静态杂质系统的格林函数

我们考虑电子被一组静态杂质散射的情形, 它将应用到输运性质的研究中去. 设体系的哈密顿为

$$\hat{H}^{\mu} = \sum_{\underline{p}}(\varepsilon^0_{\underline{p}} - \mu)\hat{c}^+_{\underline{p}}\hat{c}_{\underline{p}} + \sum_{\underline{p}\underline{p}'}V_{\underline{p}\underline{p}'}\hat{c}^+_{\underline{p}}\hat{c}_{\underline{p}'} \tag{6.3.1}$$

其中, 右端第二项是杂质势哈密顿 $\hat{H}_{\mathrm{imp}}$; $V_{\underline{p}\underline{p}'}$ 代表动量表象中杂质产生的外势场.

因

$$\hat{H}_{\rm imp} = \int \mathrm{d}^3x \hat{\psi}^+(\underline{x}) \sum_j V(\underline{x}-\underline{x}_j)\hat{\psi}(\underline{x})$$
$$= \sum_{\underline{p}\underline{p}'} \frac{1}{V} \int \mathrm{d}^3x \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\underline{p}-\underline{p}')\cdot\underline{x}} \sum_j V(\underline{x}-\underline{x}_j)\hat{c}^+_{\underline{p}}\hat{c}_{\underline{p}'}$$

所以

$$V_{\underline{p}\underline{p}'} = \frac{1}{V}\sum_j \int \mathrm{d}^3x V(\underline{x}-\underline{x}_j) e^{\mathrm{i}(\underline{p}-\underline{p}')\cdot\underline{x}} \tag{6.3.1a}$$

由于杂质破坏了平移不变性, 我们必须用两个动量来标记格林函数:

$$g(\underline{p},\underline{p}';\tau-\tau') = -\langle T\hat{c}_{\underline{p}}(\tau)\hat{c}^+_{\underline{p}'}(\tau')\rangle \tag{6.3.2}$$

它的费曼图可用图 6.3.1 表示.

图 6.3.1　有杂质散射的电子的格林函数

它的解析表达式为

$$g(\underline{p},\underline{p}';\mathrm{i}\omega_n) = g^0(\underline{p};\mathrm{i}\omega_n)\delta_{\underline{p},\underline{p}'} + \sum_{\underline{p}''} g^0(\underline{p};\mathrm{i}\omega_n)V_{\underline{p}\underline{p}''}g(\underline{p}'',\underline{p}';\mathrm{i}\omega_n) \tag{6.3.3}$$

该方程的迭代解为

$$\begin{aligned} g(\underline{p},\underline{p}';\mathrm{i}\omega_n) =& g^0(\underline{p};\mathrm{i}\omega_n)\delta_{\underline{p},\underline{p}'} + g^0(\underline{p};\mathrm{i}\omega_n)V_{\underline{p}\underline{p}'}g(\underline{p}';\mathrm{i}\omega_n) \\ &+ \sum_{\underline{p}_1} g^0(\underline{p};\mathrm{i}\omega_n)V_{\underline{p}\,\underline{p}_1}g^0(\underline{p}_1;\mathrm{i}\omega_n)V_{\underline{p}_1\,\underline{p}'}g^0(\underline{p}';\mathrm{i}\omega_n) + \cdots \end{aligned} \tag{6.3.4}$$

现在我们进一步考虑杂质是无规分布的重要情形. 杂质原子的无规位置用 $\{\underline{x}_j\}$ 表示. 对于有杂质的体材料样品, 我们不期待材料的宏观性质 (如电导等) 会依赖

于杂质的具体位置, 故我们感兴趣的是格林函数对杂质的无规分布的平均值, 从而使得物理可观察量也是对杂质分布的平均值. 物理对象 $F(\underline{x}_1, \underline{x}_2, \cdots, \underline{x}_N)$ 的杂质平均用 $\langle F\rangle_{\text{imp}} \equiv \bar{F}$ 表示:

$$\langle F\rangle_{\text{imp}} = \int \frac{\mathrm{d}^3x_1}{V}\frac{\mathrm{d}^3x_2}{V}\cdots\frac{\mathrm{d}^3x_N}{V}F(\underline{x}_1, \underline{x}_2, \cdots, \underline{x}_N) \tag{6.3.5}$$

其中, N 是样品中的杂质原子的数目; V 是样品的体积.

由于

$$V_{\underline{p}\underline{p}'} = \frac{1}{V}\sum_j \int \mathrm{d}^3x V(\underline{x} - \underline{x}_j)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\underline{p}-\underline{p}')\cdot\underline{x}}$$

$$\begin{aligned} V_{\underline{p}\underline{p}'} &= \frac{1}{V}\sum_j \int \mathrm{d}^3x V(\underline{x} - \underline{x}_j)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\underline{p}-\underline{p}')\cdot(\underline{x}-\underline{x}_j)}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\underline{p}-\underline{p}')\cdot\underline{x}_j} \\ &= \frac{1}{V}V(\underline{p}-\underline{p}')\sum_j \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\underline{p}-\underline{p}')\cdot x_j} \end{aligned} \tag{6.3.6}$$

故它对于杂质分布的平均值为

$$\langle V_{\underline{p}\underline{p}'}\rangle_{\text{imp}} = \frac{1}{V}V(\underline{p}-\underline{p}')\left\langle \sum_j \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\underline{p}-\underline{p}')\cdot\underline{x}_j}\right\rangle_{\text{imp}}$$

利用式 (6.3.5) 知

$$\begin{aligned} \left\langle \sum_j \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\underline{p}-\underline{p}')\cdot\underline{x}_j}\right\rangle_{\text{imp}} &= \int \frac{\mathrm{d}^3x_1}{V}\frac{\mathrm{d}^3x_2}{V}\cdots\frac{\mathrm{d}^3x_N}{V}\sum_{j=1}^{N}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\underline{p}-\underline{p}')\cdot\underline{x}_j} \\ &= N\int \frac{\mathrm{d}^3x}{V}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\underline{p}-\underline{p}')\cdot\underline{x}} = N\delta_{\underline{p},\underline{p}'} \end{aligned} \tag{6.3.7}$$

故

$$\langle V_{\underline{p}\underline{p}'}\rangle_{\text{imp}} = CV(\underline{0})\delta_{\underline{p}\underline{p}'} \tag{6.3.8}$$

其中, C 为杂质浓度. 现在来计算平均值

$$A \equiv \left\langle \sum_{ij} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\underline{p}-\underline{p}_1)\cdot\underline{x}_i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\underline{p}_1-\underline{p}')\cdot\underline{x}_j}\right\rangle_{\text{imp}}$$

其中, 二重级数中, $i = j$ 的项有 N 项, $i \neq j$ 的项有 $N(N-1)$ 项, 所以

$$A(i=j) = \left\langle \sum_i \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\underline{p}-\underline{p}')\cdot\underline{x}_i}\right\rangle = N\delta_{\underline{p}\underline{p}'}$$

$$A(i\neq j) = \left\langle \sum_{i\neq j} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\underline{p}-\underline{p}_1)\cdot\underline{x}_i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\underline{p}_1-\underline{p}')\cdot\underline{x}_j}\right\rangle = N(N-1)\delta_{\underline{p}\underline{p}_1}\delta_{\underline{p_1p'}}$$

所以有

$$\langle V_{\underline{p}\,\underline{p}_1} V_{\underline{p}_1\,\underline{p}'}\rangle_{\rm imp} = \frac{1}{V^2} V(\underline{p}-\underline{p}_1) V(\underline{p}_1-\underline{p}') \left\langle \sum_{ij} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\underline{p}-\underline{p}_1)\cdot \underline{x}_i} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\underline{p}_1-\underline{p}')\cdot \underline{x}_j} \right\rangle_{\rm imp}$$

$$\langle V_{\underline{p}\,\underline{p}_1} V_{\underline{p}_1\,\underline{p}'}\rangle_{\rm imp} = C^2 [V(\underline{0})]^2 \delta_{\underline{p}\,\underline{p}_1} \delta_{\underline{p}_1\,\underline{p}'} + \frac{C}{V} |V(\underline{p}-\underline{p}_1)|^2 \delta_{\underline{p}\,\underline{p}'} \tag{6.3.9}$$

其中, 利用了大 N 极限下, $N(N-1)\approx N^2$. 由式 (6.3.8) 和式 (6.3.9) 可分别得出格林函数对杂质的无规分布的平均值的一阶项和二阶项, 这样有

$$\begin{aligned}\langle g(\underline{p},\underline{p}';\mathrm{i}\omega_n)\rangle_{\rm imp} =&\delta_{\underline{p},\underline{p}'} \left[g^0(\underline{p};\mathrm{i}\omega_n) + g^0(\underline{p};\mathrm{i}\omega_n) C V(\underline{0}) g^0(\underline{p};\mathrm{i}\omega_n)\right.\\ &+ g^0(\underline{p};\mathrm{i}\omega_n) C V(\underline{0}) g^0(\underline{p};\mathrm{i}\omega_n) C V(\underline{0}) g^0(\underline{p};\mathrm{i}\omega_n)\\ &\left.+ g^0(\underline{p};\mathrm{i}\omega_n) C \frac{1}{V} \sum_{\underline{p}_1} |V(\underline{p}-\underline{p}_1)|^2 g^0(\underline{p}_1;\mathrm{i}\omega_n) g^0(\underline{p};\mathrm{i}\omega_n) + \cdots\right]\end{aligned} \tag{6.3.10}$$

图 6.3.2 显示了对应于式 (6.3.10) 的费曼图.

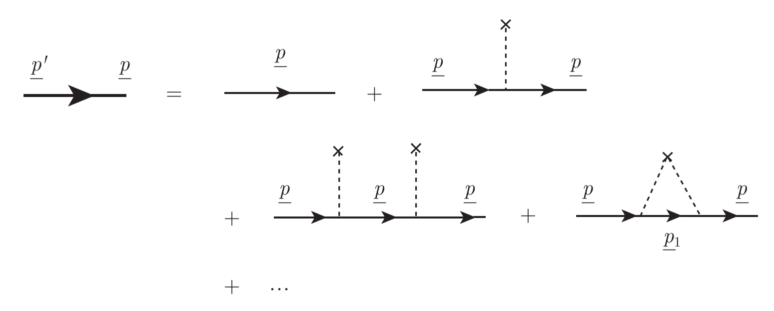


图 6.3.2　式 (6.3.10) 的费曼图表示

注意: 式 (6.3.10) 中的整体因子 $\delta_{\underline{p},\underline{p}'}$ 表明, 对杂质平均后的格林函数又恢复了平移不变性. 图 6.3.2 中, 每根虚线提供一个因子 $V(\underline{q})$, 其中, $\underline{q}$ 由动量守恒要求来确定, 每个 $\times$ 提供一个因子 C.

图 6.3.2 的第二行中的第一个图表示电子受两个不同杂质原子散射, 其后面一个图表示电子被同一个杂质原子散射两次. 图 6.3.3 是图 6.3.2 中未画出来的三阶图, 更高阶图也可类推.

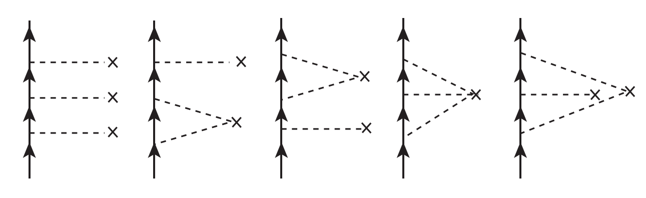


图 6.3.3　三阶费曼图

由于现在的图形与相互作用粒子的格林函数图形有许多相似之处, 我们可以引入正规自能部分 Σ, 它是所有那些不会通过截断一根实线而分成两个图的图形之和. 这样有

$$\langle g(\underline{p};\mathrm{i}\omega_n)\rangle_{\mathrm{imp}} \equiv \bar{g}(\underline{p};\mathrm{i}\omega_n) = \frac{1}{\mathrm{i}\omega_n - (\varepsilon^0_{\underline{p}} - \mu) - \Sigma(\underline{p};\mathrm{i}\omega_n)} \tag{6.3.11}$$

Σ 的最简单的图来自图 6.3.2 中等号右边第二图, 它等于 $CV(\underline{0})$, 这是一个常数, 相当于将单粒子能量作了个移动.

当散射并不弱且杂质原子的浓度很小时, Σ 的计算可用如下的 T**矩阵近似**, 其图形表示为图 6.3.4.

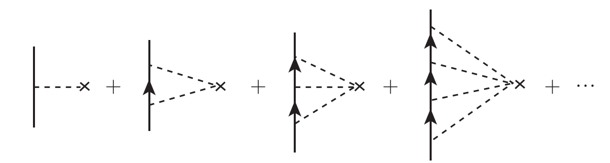


图 6.3.4　自能计算的 T 矩阵近似

它包含了所有被一单个杂质散射的图形. 由此可得

$$\begin{aligned}\Sigma(\underline{p};\mathrm{i}\omega_n) =& C\Bigg[V(\underline{0}) + \frac{1}{V}\sum_{\underline{p}_1}|V(\underline{p}-\underline{p}_1)|^2 g^0(\underline{p}_1;\mathrm{i}\omega_n)\\ &+ \frac{1}{V^2}\sum_{\underline{p}_1\underline{p}_2}V(\underline{p}-\underline{p}_1)V(\underline{p}_1-\underline{p}_2)V(\underline{p}_2-\underline{p})g^0(\underline{p}_1;\mathrm{i}\omega_n)g^0(\underline{p}_2;\mathrm{i}\omega_n)\\ &+ \cdots\Bigg] = CT(\underline{p},\underline{p};\mathrm{i}\omega_n)\end{aligned} \tag{6.3.12}$$

其中

$$\begin{aligned}T(\underline{p},\underline{p}';\mathrm{i}\omega_n) &\equiv V(\underline{p}-\underline{p}') + \frac{1}{V}\sum_{\underline{p}_1}V(\underline{p}-\underline{p}_1)V(\underline{p}_1-\underline{p}')g^0(\underline{p}_1;\mathrm{i}\omega_n) + \cdots\\ &= V(\underline{p}-\underline{p}') + \frac{1}{V}\sum_{\underline{p}_1}V(\underline{p}-\underline{p}_1)g^0(\underline{p}_1;\mathrm{i}\omega_n)T(\underline{p}_1,\underline{p}';\mathrm{i}\omega_n)\end{aligned} \tag{6.3.13}$$

称为 T**矩阵**. 注意: 图 6.3.4 中第二个图及以后的各图 (反映一个电子被同一杂质多次 (n 次) 散射的图) 将提供一个因子 $1/V^{n-1}$.

当杂质原子的浓度低且散射较弱时, 可忽略同一原子的重数大的多重散射. 这时只取式 (6.3.12) 中右端的头两项将给出合理的近似. 此时进一步作解析延拓得

$$\Sigma(\omega+\mathrm{i}0^+) = C\left[V(\underline{0}) + \int\frac{\mathrm{d}^3p_1}{(2\pi)^3}|V(\underline{p}-\underline{p}_1)|^2\frac{1}{\omega+\mathrm{i}0^+ - \varepsilon^0_{\underline{p}_1} + \mu}\right]$$

$$=C\left[V(\underline{0})+P\int\frac{\mathrm{d}^3p_1}{(2\pi)^3}|V(\underline{p}-\underline{p}_1)|^2\frac{1}{\omega-\varepsilon^0_{\underline{p}_1}+\mu}\right.$$
$$\left.+(-\mathrm{i}\pi)\int\frac{\mathrm{d}^3p_1}{(2\pi)^3}|V(\underline{p}-\underline{p}_1)|^2\delta(\omega-\varepsilon^0_{\underline{p}_1}+\mu)\right]$$

这样, 从式 (6.3.11) 由 $\bar{g}(\underline{p};\omega+\mathrm{i}0^+)$ 的极点的实部, 得到准粒子能量 (近似取重整化常数 Z_p 为 1) 为

$$\varepsilon_{\underline{p}}=\varepsilon^0_{\underline{p}}+CV(\underline{0})+C\cdot P\int\frac{\mathrm{d}^3p_1}{(2\pi)^3}|V(\underline{p}-\underline{p}_1)|^2\frac{1}{\varepsilon^0_{\underline{p}}-\varepsilon^0_{\underline{p}_1}} \tag{6.3.14}$$

由于浓度低且相互作用是弱的, 故式 (6.3.14) 右边最后两项是小的修正. 所以当我们计算寿命时, 可以用 $\varepsilon_{\underline{p}}\approx\varepsilon^0_{\underline{p}}$ 来代入式 (2.7.27) 中, 故寿命为

$$2\tau=\left[C\pi\int\frac{\mathrm{d}^3p_1}{(2\pi)^3}|V(\underline{p}-\underline{p}_1)|^2\delta(\varepsilon^0_{\underline{p}}-\varepsilon^0_{\underline{p}_1})\right]^{-1} \tag{6.3.15}$$

除了上述情形外, 一个常使用的选择是**自洽玻恩近似 (SCBA)**, 如图 6.3.5 所示.

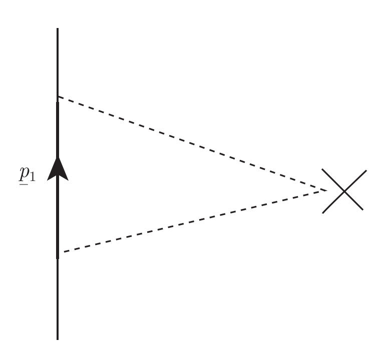


图 6.3.5　自洽玻恩近似下的自能

$$\Sigma_{\mathrm{SCBA}}(\underline{p},\mathrm{i}\omega_n)=C\frac{1}{V}\sum_{\underline{p}_1}|V(\underline{p}-\underline{p}_1)|^2\bar{g}(\underline{p}_1,\mathrm{i}\omega_n) \tag{6.3.16}$$

它和式 (6.3.11) 一起定义了杂质平均格林函数的一个自洽问题. 这里已把 $CV(\underline{0})$ 吸收到单粒子能量中. 显然, 图 6.3.5 并不包含任何所谓的**交叉图**, 如图 6.3.6 所示.

若设杂质的势是球对称的, 则容易找到这个问题的自洽解. 因为对于球对称势就不用考虑势对动量的依赖. 事实上, 因 $V(\underline{x})=V(r)$, 其中, $r=|\underline{x}|$. 设 α 是 $\underline{x}$ 与 $(\underline{p}-\underline{p}')$ 之间的夹角, θ 是 $\underline{p}$ 与 $\underline{p}'$ 之间的夹角.

$$V(\underline{p}-\underline{p}')=\int\mathrm{d}^3x\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\underline{p}-\underline{p}')\cdot\underline{x}}V(\underline{x})=\int\mathrm{d}\Omega\int r^2\mathrm{d}r\mathrm{e}^{\mathrm{i}|\underline{p}-\underline{p}'|r\cos\alpha}V(r)$$

$$= \int \mathrm{d}\varphi \int \mathrm{d}\alpha \sin\alpha \int \mathrm{d}r r^2 \mathrm{e}^{\mathrm{i}\sqrt{2}p_{\mathrm{F}}\sqrt{1-\cos\theta}r\cos\alpha} V(r) \equiv V(\theta)$$

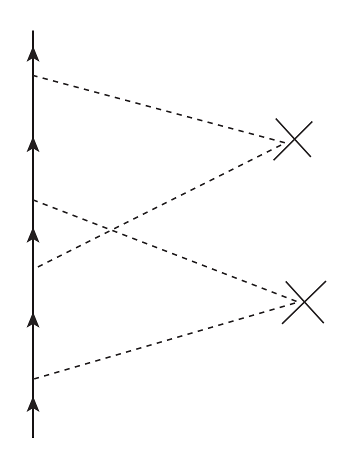


图 6.3.6　有交叉的自能图

这里利用了所有动量的大小都接近 p_{F} 的事实, 使得

$$|\underline{p} - \underline{p}'| = \sqrt{(\underline{p} - \underline{p}')^2} \approx \sqrt{2}p_{\mathrm{F}}\sqrt{1-\cos\theta}$$

我们首先在最低阶情形 (其费曼图是图 6.3.4 中的第二图) 计算自能, 此时有

$$\begin{aligned} \varSigma(\mathrm{i}\omega_n) &= C\int \frac{\mathrm{d}^3 p_1}{(2\pi)^3}|V(\theta)|^2 \frac{1}{\mathrm{i}\omega_n - \varepsilon_{p_1} + \mu} \\ &= C\int N(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon \frac{\mathrm{d}\Omega}{4\pi}|V(\theta)|^2 \frac{1}{\mathrm{i}\omega_n - \varepsilon + \mu} \\ &= CV_0^2 N(\varepsilon_{\mathrm{F}})\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\varepsilon \frac{1}{\mathrm{i}\omega_n - \varepsilon + \mu} \end{aligned} \tag{6.3.17}$$

其中, $V_0^2 = \int |V(\theta)|^2 \mathrm{d}\Omega/(4\pi)$, 我们也作了用 $N(\varepsilon_{\mathrm{F}})$ 来替代能态密度的近似, 这在主要贡献来自于接近费米能的电子的情形是一个好的常用的近似. 又因积分

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\varepsilon \frac{1}{\mathrm{i}\omega_n + \mu - \varepsilon} = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\varepsilon \frac{\mathrm{i}\omega_n + \mu + \varepsilon}{(\mathrm{i}\omega_n + \mu - \varepsilon)(\mathrm{i}\omega_n + \mu + \varepsilon)}$$

其分母是 ε 的偶函数, 故可去掉分子中的 ε(奇函数). 这样分母中的 ε 将比分子高出二次, 从而可用残数定理.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\varepsilon \frac{\mathrm{i}\omega_n + \mu}{(\mathrm{i}\omega_n + \mu - \varepsilon)(\mathrm{i}\omega_n + \mu + \varepsilon)} = -\mathrm{i}\pi \mathrm{sgn}(\omega_n) \tag{6.3.18}$$

代入式 (6.3.17) 中得

$$\Sigma(\mathrm{i}\omega_n) = -\mathrm{i}\frac{1}{2\tau}\mathrm{sgn}(\omega_n) \tag{6.3.19}$$

其中, 我们已认证 $\tau^{-1} = CV_0^2 N(\varepsilon_{\mathrm{F}})2\pi$(参见式 (6.3.15)).

现在可以重新计算自能 $\Sigma(\mathrm{i}\omega_n)$ 来验证自洽性了. 此时式 (6.3.16) 成为

$$\Sigma(\mathrm{i}\omega_n) = \frac{CV_0^2}{V}\sum_{\underline{p}_1}\frac{1}{\mathrm{i}\omega_n + \mu - \varepsilon_{\underline{p}_1} - \Sigma(\mathrm{i}\omega_n)} \tag{6.3.20}$$

若再次进行能量积分, 就会发现自洽性的施加并不会影响到寿命.

$$\begin{aligned}\Sigma(\mathrm{i}\omega_n) &= CV_0^2 N(\varepsilon_{\mathrm{F}})\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\varepsilon\frac{1}{\mathrm{i}\omega_n + \mu - \varepsilon - \Sigma(\mathrm{i}\omega_n)}\\ &= -\mathrm{i}\frac{1}{2\tau}\mathrm{sgn}(\omega_n)\end{aligned} \tag{6.3.21}$$

这样, 在自洽玻恩近似和球对称势情形, 杂质平均格林函数为

$$\bar{g}(\underline{p};\mathrm{i}\omega_n) = \frac{1}{\mathrm{i}\omega_n - (\varepsilon_{\underline{p}} - \mu) + \mathrm{i}\dfrac{1}{2\tau}\mathrm{sgn}(\omega_n)} \tag{6.3.22}$$

可以看出式 (6.3.21) 和式 (6.3.22) 是一致的. 以上的近似有如下几个注意点: ① 适用于简并费米体系, 但对于轻度掺杂的半导体却需要修正, 因为那时杂质散射势明显依赖于能量; ② 我们忽略了自能的实部, 它可被吸收到单粒子能量中; ③ 虽然忽略了交叉图, 但对于体材料, 一般情形下自洽玻恩近似已包括了最重要的图形. 其原因可从将图 6.3.7(a) 所示的交叉图与图 6.3.7(b) 所示的非交叉图进行比较看出.

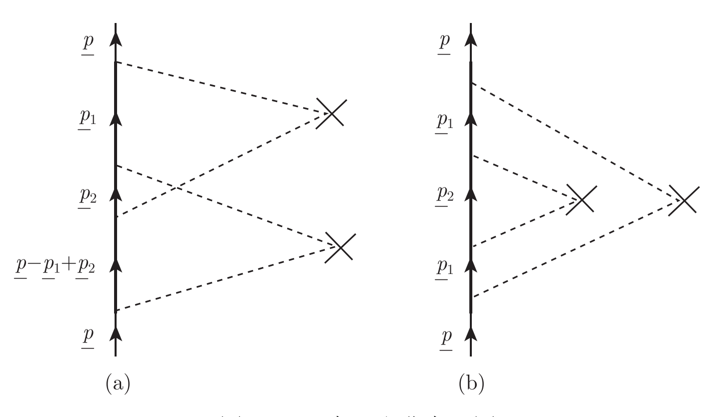


图 6.3.7　交叉和非交叉图

$$\Sigma^{(\mathrm{a})}(\underline{p},\omega) \sim c^2\tilde{V}^4\sum_{\underline{p}_1\underline{p}_2}\bar{g}(\underline{p}_1,\omega)\bar{g}(\underline{p}_2,\omega)\bar{g}(\underline{p}-\underline{p}_1+\underline{p}_2,\omega) \tag{6.3.23}$$

$$\Sigma^{(\mathrm{b})}(\underline{p},\omega) \sim c^2\tilde{V}^4 \sum_{\underline{p}_1\underline{p}_2} \bar{g}(\underline{p}_1,\omega)\bar{g}(\underline{p}_2,\omega)\bar{g}(\underline{p}_1,\omega) \tag{6.3.24}$$

其中, $\tilde{V}$ 是势.

由于杂质对电子的散射是弹性散射, 所有动量和能量限制在费米面附近的电子才受到散射. 对于微扰论中的同阶图形的贡献大小的显著差别一定来自于对角度的积分. 在计算 $\Sigma^{(\mathrm{b})}$ 时, 对两个内动量 $\underline{p}_1$ 和 $\underline{p}_2$ 的积分中没有对角变量施加额外限制. 取 $\omega \approx \varepsilon^0_{\underline{p}} - \mu$, 则由式 (6.3.11) 知, 式 (6.3.21) 中的每个格林函数都给出了一个量级为 $(1/\tau)^{-1}$ 的贡献, 故对 $\Sigma^{(\mathrm{b})}$ 的总贡献为 $\Sigma^{(\mathrm{b})} \propto c^2\tilde{V}^4(1/\tau)^{-3}$. 但是对于 $\Sigma^{(\mathrm{a})}$ 的情形不一样, 式 (6.3.19) 中仅前面两个格林函数, 每个可提供 $(1/\tau)^{-1}$ 外, 第三个格林函数在进行角积分后, 只能给出量级为 $1/\varepsilon_{\mathrm{F}}$ 的贡献, 这是因为动量要受到额外的更多限制: $|\underline{p}-\underline{p}_1+\underline{p}_2| \approx p_{\mathrm{F}}$. 这样 $\Sigma^{(\mathrm{a})}/\Sigma^{(\mathrm{b})}$ 的量级是 $\dfrac{1}{\varepsilon_{\mathrm{F}}\tau} \propto \dfrac{1}{p_{\mathrm{F}}l}$, 其中, $l = v_{\mathrm{F}}\tau$ 是电子的平均自由程, 它与杂质浓度成反比, 所以在当杂质原子的浓度低的情形下, $p_{\mathrm{F}}l \gg 1$, 从而可略去图 6.3.7(a) 的贡献.

但对于二维空间情形, $\dfrac{1}{p_{\mathrm{F}}l}$ 所引起的修正也必须加以考虑.

二、费曼规则和光电导的计算

我们可以给出计算此时的**虚时关联函数的费曼规则**.

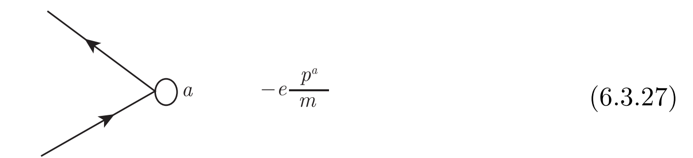
电子传播子 (以下简记为 g 而不再用 $\bar{g}$):

$$p \qquad g(\underline{p},\mathrm{i}\omega_r) = \frac{1}{\mathrm{i}\omega_r - (\varepsilon_{\underline{p}}-\mu) + \mathrm{i}\,\dfrac{1}{2\tau}\mathrm{sgn}(\omega_r)} \tag{6.3.25}$$

其中, $p = (\underline{p}, \mathrm{i}\omega_r)$, $\omega_r = (2r+1)\pi/\beta$, 并且我们**已计及了无规杂质散射的最重要阶的效应**(采用了自洽玻恩近似). 为简单起见, 将式 (6.1.8) 中的电流密度算符作一个平移变换: $\underline{p} + \dfrac{\underline{q}}{2} \to \underline{p}$. 则有

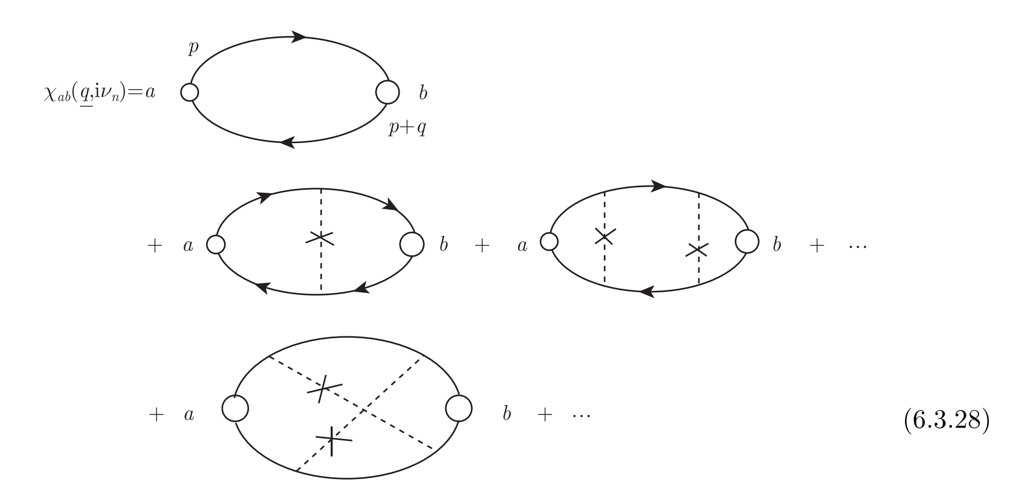
$$\underline{j}(\underline{q}) = \frac{-e}{m}\sum_{\underline{p},\sigma} \underline{p}\,\hat{c}^{+}_{\underline{p}-\underline{q}/2,\sigma}\hat{c}_{\underline{p}+\underline{q}/2,\sigma} \tag{6.3.26}$$

这样, $\underline{j}$-顶角 (**流顶角**) 可以表示为



(6.3.27)

虚时关联函数 $\chi_{ab}(\underline{q},\mathrm{i}\nu_n)$(其中, $\nu_n = 2n\pi/\beta$) 的图形可表示为



(6.3.28)

它的图形共分为三类, 式 (6.3.28) 第一行中的唯一一个图是第一类图. 该图每条传播子线已计及了杂质散射效应, 但两条传播子线之间并没有杂质散射虚线相连. 式 (6.3.28) 第二行中的图属于第二类图, 其中两传播子之间的不同杂质的杂质虚线没有交叉. 这类图形叫**梯形 (Ladder) 图**. 例如, 图 6.3.8 也是一种梯形图.

式 (6.3.28) 最后一行的图属于第三类图, 其中不同杂质的杂质虚线相互交叉. 第三章第六节曾分析指出, 交叉图导致量级为 $1/(p_{\mathrm{F}}l)$ 的量子修正. 对于低浓度杂质原子情形, 一般可以略去这种修正. 但这种修正却与后面要讨论的电子局域化有关.

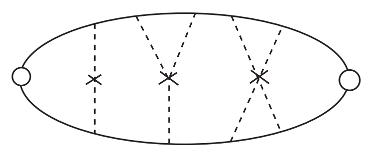


图 6.3.8　一种梯形图

现在考虑任意关联函数 (不仅是式 (6.3.27) 和式 (6.3.28) 中考虑的流–流关联函数) 如下的**梯形分解**, 如图 6.3.9 所示.

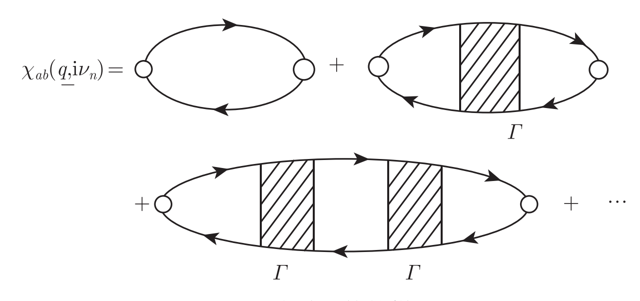


图 6.3.9　关联函数的梯形分解

图 6.3.9 中, 阴影部分定义了**两粒子不可约顶角函数** $\varGamma^{\sigma\sigma'}_{\underline{k}\underline{k}'\underline{q}}(\mathrm{i}\omega,\mathrm{i}\omega';\mathrm{i}\nu)$, 如图 6.3.10 所示, 其中粗线代表相互作用费米子传播子 g. 两粒子不可约指不能通过截断两根实线使图分成两个图.

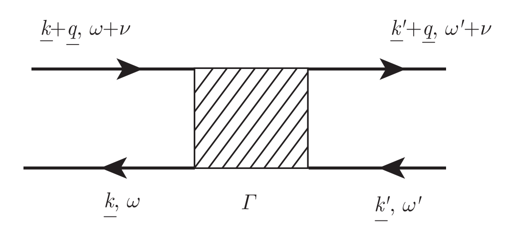


图 6.3.10　两粒子不可约顶角 $\varGamma$

图 6.3.9 意味着有

$$\begin{aligned}\chi(\underline{q},\mathrm{i}\nu_n) =& -\sum_{\underline{k},\mathrm{i}\omega,\sigma} A_{\underline{k}\sigma} g(\underline{k},\mathrm{i}\omega) g(\underline{k}+\underline{q},\mathrm{i}\omega+\mathrm{i}\nu) A_{\underline{k}+\underline{q},\sigma} \\ &+ \sum_{\underline{k},\mathrm{i}\omega,\sigma}\sum_{\underline{k}',\mathrm{i}\omega',\sigma'} A_{\underline{k}\sigma} g(\underline{k},\mathrm{i}\omega) g(\underline{k}+\underline{q},\mathrm{i}\omega+\mathrm{i}\nu) \varGamma^{\sigma\sigma'}_{\underline{k}\underline{k}'\underline{q}}(\mathrm{i}\omega,\mathrm{i}\omega';\mathrm{i}\nu) \\ &\cdot g(\underline{k}',\mathrm{i}\omega') g(\underline{k}'+\underline{q},\mathrm{i}\omega'+\mathrm{i}\nu) A_{\underline{k}'+\underline{q},\sigma'} + \cdots \end{aligned} \tag{6.3.29}$$

其中, $A_{\underline{k}\sigma}$ 等代表 A-顶角的贡献.

下面讨论仅光电导. 由于光速很大, 所以在电子输运中可取极限 $\underline{q}\to 0$, 并将虚时关联函数 $\chi_{ab}(\underline{q}=0,\mathrm{i}\nu_n)$ 记为 $\chi_{ab}(\mathrm{i}\nu_n)$.

第一类图形及其贡献为

$\underline{p},\ \mathrm{i}\omega_r$　　a　　b　　$\underline{p},\ \mathrm{i}\omega_r+\mathrm{i}\nu_n$

$$= -\frac{1}{\beta}\frac{2e^2}{m^2}\sum_{\underline{p},r} p^a p^b g(\underline{p},\mathrm{i}\omega_r) g(\underline{p},\mathrm{i}\omega_r+\mathrm{i}\nu_n) \tag{6.3.30}$$

其中, 系数 2 来自于对自旋分量的求和; 负号来自费米圈. 所以

$$\chi_{ab}(\mathrm{i}\nu_n) - \chi_{ab}(0) = \frac{-2e^2}{\beta m^2}\sum_{\underline{p},r} p^a p^b \left[g(\underline{p},\mathrm{i}\omega_r) g(\underline{p},\mathrm{i}\omega_r+\mathrm{i}\nu_n) - \{\mathrm{i}\nu_n\to 0\}\right] \tag{6.3.31}$$

注意的是, 尽管式 (6.3.31) 流–流响应函数在任意一个频率上的大小都能涉及远离费米面的电子态, 但式 (6.3.31) 右端的差值在低频处将被消去其大部分贡献, 而剩

下的主要贡献来自费米面附近的电子态, 这样我们可以将式 (6.3.31) 对动量的求和转换成对能量的积分并且将能态密度近似地看成费米面处的常数, 即

$$\frac{1}{m^2}\sum_{\underline{p}} p^a p^b [\cdots] \to \frac{V}{3}\delta_{ab} v_{\mathrm{F}}^2 N(\varepsilon_{\mathrm{F}}) \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\varepsilon\, [\cdots] \tag{6.3.32}$$

$$\begin{aligned}\chi_{ab}(\mathrm{i}\nu_n) - \chi_{ab}(0) =& \frac{-2e^2 V}{3\beta}\delta_{ab} v_{\mathrm{F}}^2 N(\varepsilon_{\mathrm{F}}) \sum_r \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\varepsilon \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varepsilon 0^-} \\ &\cdot \left[\frac{1}{\mathrm{i}\omega_r - \varepsilon + \mathrm{isgn}\omega_r/(2\tau)}\right. \\ &\left.\cdot \frac{1}{\mathrm{i}\omega_r^+ - \varepsilon + \mathrm{isgn}\omega_r^+/(2\tau)} - \{\mathrm{i}\nu_n \to 0\}\right]\end{aligned} \tag{6.3.33}$$

其中, $\omega_r^+ \equiv \omega_r + \nu_n$. 显然, 由于被积表达式中的第二项的两个极点在实轴上下的同一侧, 其积分为零, 所以只有第一项才对积分做贡献. 第一项的极点分别为 $\mathrm{i}\omega_r^+ + \mathrm{isgn}\omega_r^+/(2\tau)$ 和 $\mathrm{i}\omega_r + \mathrm{isgn}\omega_r/(2\tau)$. 考虑 $\nu_n > 0$ 的情形 ($\nu_n < 0$ 的情形可类似处理), 则只要 $0 > \omega_r > -\nu_n$, 就可以得到对积分有非零贡献的极点分布: $\mathrm{i}\omega_r^+ + \mathrm{i}/(2\tau)$ 和 $\mathrm{i}\omega_r - \mathrm{i}/(2\tau)$. 这样

$$\begin{aligned}\chi_{ab}(\mathrm{i}\nu_n) - \chi_{ab}(0) &= \frac{-2e^2 V}{3\beta}\delta_{ab} v_{\mathrm{F}}^2 N(\varepsilon_{\mathrm{F}}) \sum_{0>\omega_r>-\nu_n} \frac{-2\pi\mathrm{i}}{\mathrm{i}\nu_n + \mathrm{i}/\tau} \\ &= \frac{-2e^2 V}{3\beta}\delta_{ab} v_{\mathrm{F}}^2 N(\varepsilon_{\mathrm{F}}) \frac{-2\pi\mathrm{i}}{\mathrm{i}\nu_n + \mathrm{i}/\tau} \cdot \frac{0-(-\nu_n)}{\Delta\nu_n}\end{aligned} \tag{6.3.34}$$

其中, $\Delta\nu_n = 2\pi/\beta$. 利用在费米能级 ε_{F} 处的态密度

$$N(\varepsilon_{\mathrm{F}}) = \frac{1}{V}\sum_{\underline{p}} \delta(\varepsilon_{\mathrm{F}} - \varepsilon_{\underline{p}}) = \frac{m p_{\mathrm{F}}}{2\pi^2} \tag{6.3.35}$$

以及粒子数密度 (参见式 (2.6.23))

$$n = \frac{p_{\mathrm{F}}^3}{3\pi^2} \tag{6.3.36}$$

由此二式知

$$\frac{n}{m} = \frac{2 v_{\mathrm{F}}^2 N(\varepsilon_{\mathrm{F}})}{3} \tag{6.3.37}$$

将上式代入式 (6.3.34) 中 (注意该式中已取 $\varepsilon_{\mathrm{F}} = 0$), 得

$$\chi_{ab}(\mathrm{i}\nu_n) - \chi_{ab}(0) = \delta_{ab}\frac{ne^2 V}{m} \cdot \frac{\mathrm{i}\nu_n}{\mathrm{i}\nu_n + \mathrm{i}/\tau}$$

故

$$\sigma_{ab}(\nu) = \frac{\mathrm{i}}{\nu V}\left[\chi_{ab}(\nu + \mathrm{i}0^+) - \chi_{ab}(\mathrm{i}0^+)\right]$$

$$= \delta_{ab} \frac{ne^2}{m} \frac{1}{\tau^{-1} - \mathrm{i}\nu} \tag{6.3.38}$$

在以上计算中我们忽略了非各向同性散射效应. 下面对此作出应有的修正. 考虑包含**梯形顶角修正**的图 6.3.11.

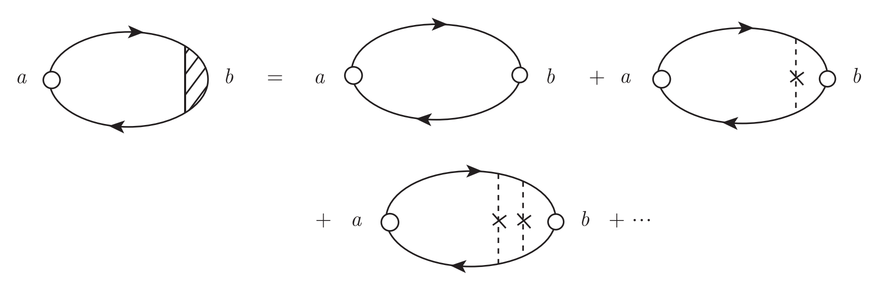


图 6.3.11　梯形顶角修正图

图 6.3.11 中, 顶角修正部分记为 $-ev_{\mathrm{F}}^b \Lambda$(我们只关心绝对值接近于 $p_{\mathrm{F}} = mv_{\mathrm{F}}$ 的动量 $\underline{p}$):

b　$= -ev_{\mathrm{F}}^b \Lambda$　(6.3.39)

它满足如下的自洽 Dyson 方程:

$-ev_{\mathrm{F}}^b \Lambda$ = b + b

$\underline{p}'$,iω_r

$\underline{p}'$,iω_r+iν_n

即

$$\begin{aligned} -ev_{\mathrm{F}}^b \Lambda(\omega_r, \nu_n) = & -ev_{\mathrm{F}}^b \\ & + C \sum_{\underline{p}'} |V(\underline{p} - \underline{p}')|^2 g(\underline{p}', \mathrm{i}\omega_r + \mathrm{i}\nu_n) \\ & \cdot g(\underline{p}', \mathrm{i}\omega_r)(-e)\nu'^b_{\mathrm{F}} \Lambda(\omega_r, \nu_n) \end{aligned} \tag{6.3.40}$$

这里已假设顶角修正部分仅依赖于频率而与动量无关. 设 θ 是 $\underline{p}$ 与 $\underline{p}'$ 之间的夹角, 并假定杂质势是球对称的: $V(\underline{x}) \equiv V(r)$, 它的傅里叶分量 $V(\underline{p} - \underline{p}')$ 则将仅

依赖于角度 θ. 式 (6.3.40) 两端同乘以 $\sum_b v_{\mathrm{F}}^b/v_{\mathrm{F}}^2$, 并注意到 $\sum_b v_{\mathrm{F}}^b v_{\mathrm{F}}^b/v_{\mathrm{F}}^2 = 1$, 而 $\sum_b v_{\mathrm{F}}^b {v'}_{\mathrm{F}}^b/v_{\mathrm{F}}^2 = \underline{v}_F \cdot \underline{v}'_F/v_{\mathrm{F}}^2 = \cos\theta$. 可得

$$\Lambda = 1 + \Lambda C \int \frac{\mathrm{d}\cos\theta}{2}|V(\theta)|^2 \cos\theta N(\varepsilon_{\mathrm{F}}) \int \mathrm{d}\varepsilon g(\varepsilon, \mathrm{i}\omega_r + \mathrm{i}\nu_n) g(\varepsilon, \mathrm{i}\omega_r) \tag{6.3.41}$$

其中

$$\begin{aligned}
&\int \mathrm{d}\varepsilon g(\varepsilon, \mathrm{i}\omega_r + \mathrm{i}\nu_n) g(\varepsilon, \mathrm{i}\omega_r) \\
&= \int \mathrm{d}\varepsilon \frac{1}{\mathrm{i}\omega_r + \mathrm{i}\nu_n - \varepsilon + \mathrm{i}\dfrac{1}{2\tau}\mathrm{sgn}(\nu_n + \omega_r)} \frac{1}{\mathrm{i}\omega_r - \varepsilon + \mathrm{i}\dfrac{1}{2\tau}\mathrm{sgn}(\omega_r)} \\
&= \begin{cases} \dfrac{2\pi}{\tau^{-1} + \nu_n} & (-\nu_n < \omega_r < 0) \\ 0 & (\text{其他}) \end{cases}
\end{aligned} \tag{6.3.42}$$

另外

$$\int \frac{\mathrm{d}\cos\theta}{2}|V(\theta)|^2 \cos\theta \equiv \overline{|V(\theta)|^2 \cos\theta}$$

是角度平均. 代入式 (6.3.41) 得

$$\Lambda = \begin{cases} 1 + \dfrac{\Lambda\tilde{\tau}^{-1}}{\tau^{-1} + \nu_n} & (-\nu_n < \omega_r < 0) \\ 0 & (\text{其他}) \end{cases} \tag{6.3.43}$$

故有

$$\Lambda = \begin{cases} \dfrac{\tau^{-1} + \nu_n}{\tau_{\mathrm{tr}}^{-1} + \nu_n} & (-\nu_n < \omega_r < 0) \\ 1 & (\text{其他}) \end{cases} \tag{6.3.44}$$

其中

$$\begin{aligned}
\tilde{\tau}^{-1} &= 2\pi C N(\varepsilon_{\mathrm{F}}) \overline{|V(\theta)|^2 \cos\theta} \\
\tau_{\mathrm{tr}}^{-1} &= \tau^{-1} - \tilde{\tau}^{-1} = 2\pi C N(0) \overline{|V(\theta)|^2 (1 - \cos\theta)}
\end{aligned} \tag{6.3.45}$$

这样, 当我们重新计算 $\chi_{ab}(\mathrm{i}\nu_n) - \chi_{ab}(0)$ 时, 应该将式 (6.3.33) 中的顶角贡献因子作如下修正:

$$ev_{\mathrm{F}} ev_{\mathrm{F}} \to ev_{\mathrm{F}} \left[ev_{\mathrm{F}} \Lambda(\mathrm{i}\omega_r, \mathrm{i}\nu_n)\right] \tag{6.3.46}$$

这样不难得到

$$\sigma_{ab}(\nu) = \delta_{ab} \frac{ne^2}{m} \frac{1}{\tau_{\mathrm{tr}}^{-1} - \mathrm{i}\nu} \tag{6.3.47}$$

对比式 (6.3.38) 与式 (6.3.37) 可以看出, 顶角修正贡献的效应是将**电子散射速率**τ^{-1}变成了**输运弛豫速率 (transport relaxation rate)**$\tau_{\rm tr}^{-1}$, 后者中多含有一个因子 $1-\cos\theta$, ($\tau^{-1}=2\pi CN(0)\overline{|V(\theta)|^2}$) 这意味着仅大角度散射能引起电流衰减. 对于杂质散射, 这两者的区别不是非常重要, 但对于散射集中于 $\underline{q}=0$ 附近的体系 (如铁磁自旋涨落散射), 因子 $1-\cos\theta$ 将显著地降低作为电阻来源的散射的有效性.

在式 (6.3.37) 中取 $\nu\to 0$, 可得出关于直流电导 $\sigma_{\rm DC}$ 的**Drude 公式**:

$$\sigma_{\rm DC}=\frac{ne^2}{m}\tau_{\rm tr} \tag{6.3.48}$$

第四节　扩散输运中的干涉

一、扩散

扩散输运典型地意味着所研究的材料由一个相对低的迁移率所表征. 在某种意义上, 这种输运可以被认为由相对大数目的杂质散射中心之间的短路程所构成.

在本章第三节对光电导的计算结果表明, 其中不存在扩散极点. 这是因为利用了规范: $\varphi=0,\underline{A}\neq 0$, 其中, 矢势 $\underline{A}$ 通常被施加了库仑规范条件 (或 London 规范条件)$\boldsymbol{\nabla}\cdot\underline{A}=0$. 在动量表象中, 这意味着 $\underline{q}\cdot\underline{A}=0$ 或 $\underline{q}\cdot\underline{E}=0$, 即我们考虑的是横向电场, 由此所引起的横向电流涨落时不会改变电荷密度.

为了揭示扩散现象的存在和规律, 我们来研究密度–密度响应函数. 设外电势为 $\varphi(\underline{q})$. 则由表 6.1.1 以及式 (6.1.5) 知 $\hat{H}_{1t}$ 为

$$\hat{H}_{1t}=\frac{-e}{V}\sum_{\underline{q}}\hat{\varphi}(\underline{q},t)\hat{n}(-\underline{q}) \tag{6.4.1}$$

其中, $\hat{n}(\underline{q})=\sum\limits_{\underline{p}\sigma}\hat{c}^+_{\underline{p}\sigma}\hat{c}_{\underline{p}+\underline{q},\sigma}$ 为电子数密度.

由此由线性响应理论知

$$\langle\delta\hat{n}(\underline{q})\rangle_t=\frac{-e}{V}\int_{-\infty}^{\infty}{\rm d}t'\chi^{\rm r}_{nn}(\underline{q},t-t')\varphi(\underline{q},t') \tag{6.4.2}$$

其中, χ^r_{nn} 为推迟密度–密度响应函数:

$$\chi^{\rm r}_{nn}(\underline{q},t-t')\equiv -{\rm i}\theta(t-t')\langle\big[\hat{n}(\underline{q},t),\hat{n}(-\underline{q},t')\big]\rangle \tag{6.4.3}$$

由 $\underline{E}=-\boldsymbol{\nabla}\varphi$ 知

$$\underline{E}(\underline{q},t)=-{\rm i}\underline{q}\varphi(\underline{q},t)$$

故

$$\varphi(\underline{q},t)={\rm i}\frac{\underline{\varepsilon}\cdot\underline{q}}{|\underline{q}|^2}{\rm e}^{-{\rm i}\nu t}\equiv\varphi(\underline{q}){\rm e}^{-{\rm i}\nu t} \tag{6.4.4}$$

利用

$$\langle \delta\hat{n}(\underline{q})\rangle_t = \delta n(\underline{q},\nu)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\nu t} \tag{6.4.5}$$

可得

$$\begin{aligned}\delta n(\underline{q},\nu) &= \frac{-e}{V}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t'\mathrm{e}^{\mathrm{i}\nu(t-t')}\chi^{\mathrm{r}}_{nn}(\underline{q},t-t')\varphi(\underline{q})\\ &= \frac{-e}{V}\chi^{\mathrm{r}}_{nn}(\underline{q},\nu)\varphi(\underline{q})\end{aligned} \tag{6.4.6}$$

为符号的简单, 令 $p\equiv(\underline{p},\mathrm{i}\omega_r)$. 则在松原表象中, 有

$$= \frac{-2}{\beta}\sum_p g(p+q)g(p)\Lambda(p,q) \tag{6.4.7}$$

其中, 符号来自费米圈; 2 来自旋简并度; $e\Lambda(p,q)$ 为顶角因子:

$$= 1 + C\sum_{p'}|V(p-p')|^2 g(p'+q)g(p')\Lambda(p',q) \tag{6.4.8}$$

设 V 是点散射势, 不妨设散射点在 $\underline{x}=0$ 的原点处, 则有

$$V(\underline{p}-\underline{p}') = \int \mathrm{d}^3x V_0\delta(\underline{x})\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\underline{p}-\underline{p}')\cdot\underline{x}} = V_0$$

则 V 与动量无关, 并使得 $\Lambda(p,q)$ 仅依赖于 $p\equiv(\underline{p},\mathrm{i}\omega_r)$ 中的频率分量, 即

$$\Lambda(\mathrm{i}\omega_r,q) = 1 + CV_0^2\sum_p g(p+q)g(p)\Lambda(\mathrm{i}\omega_r,q) \tag{6.4.9}$$

令

$$\Pi(\mathrm{i}\omega_r,q) = CV_0^2\sum_p g(p+q)g(p) \tag{6.4.10}$$

则有

$$\Lambda(\mathrm{i}\omega_r, q) = \frac{1}{1 - \Pi(\mathrm{i}\omega_r, q)} \tag{6.4.11}$$

将公式

$$g(p) \equiv g(\underline{p}, \mathrm{i}\omega_r) = \frac{1}{\mathrm{i}\tilde{\omega}_r - \varepsilon_{\underline{p}}} \tag{6.4.12}$$

(其中, $\tilde{\omega}_r \equiv \omega_r + \mathrm{sgn}(\omega_r)/(2\tau)$) 代入式 (6.4.10) 中并利用费米面附近处的能量

$$\varepsilon_{\underline{p}+\underline{q}} = \frac{(\underline{p}+\underline{q})^2}{2m} \approx \varepsilon_{\underline{p}} + \underline{v}_\mathrm{F} \cdot \underline{q}$$

得

$$\Pi(\mathrm{i}\omega_r, q) = CV_0^2 N(0) \int \frac{\mathrm{d}\Omega}{4\pi} \int \mathrm{d}\varepsilon \frac{1}{\mathrm{i}(\widetilde{\omega_r + \nu_n}) - (\varepsilon_{\underline{p}} + \underline{v}_\mathrm{F} \cdot \underline{q})} \frac{1}{\mathrm{i}\tilde{\omega}_r - \varepsilon} \tag{6.4.13}$$

若 $\nu_n > 0$, 则该积分仅在 $-\nu_n < \omega_r < 0$ 的区域内才给出非零结果. 此时

$$\Pi(\mathrm{i}\omega_r, q) = \int \frac{\mathrm{d}\Omega}{4\pi} \frac{1}{1 + \nu_n\tau - \mathrm{i}\underline{v}_\mathrm{F} \cdot \underline{q}\tau} \tag{6.4.14}$$

其中, $\tau^{-1} = 2\pi CV_0^2 N(0)$. 现在考虑 $\nu_n\tau \ll 1$ 及 $\underline{v}_\mathrm{F} \cdot \underline{q}\tau \ll 1$ 的情形, 这意味着我们感兴趣的是缓慢的很长波长的电荷涨落. 故

$$\begin{aligned}\Pi(\mathrm{i}\omega_r, q) &= \int \frac{\mathrm{d}\Omega}{4\pi} \left[1 - \nu_n\tau + \mathrm{i}\underline{v}_\mathrm{F} \cdot \underline{q}\tau - (\underline{v}_\mathrm{F} \cdot \underline{q})^2\tau^2 + \cdots\right] \\ &= 1 - \nu_n\tau - \frac{1}{3}v_\mathrm{F}^2\underline{q}^2\tau^2 + \cdots \\ &= 1 - \nu_n\tau - D\underline{q}^2\tau + \cdots\end{aligned} \tag{6.4.15}$$

其中, 引入了扩散常数 D, $D = v_\mathrm{F}^2\tau/3$. 这样可导致

$$\Lambda(\mathrm{i}\omega_r, q) = \begin{cases} \dfrac{\tau^{-1}}{\nu_n + D\underline{q}^2} & (-|\nu_n| < \mathrm{sgn}(\nu_n)\omega_r < 0) \\ 1 & (\text{其他}) \end{cases} \tag{6.4.16}$$

代入式 (6.4.7) 得

$$\chi_{nn}(\underline{q}, \mathrm{i}\nu_n) = \frac{-2}{\beta} N(0) V \int \mathrm{d}\varepsilon g(\varepsilon, \mathrm{i}\omega_r + \mathrm{i}\nu_n) g(\varepsilon, \mathrm{i}\omega_r) \Lambda(\mathrm{i}\omega_r, \mathrm{i}\nu_n) \tag{6.4.17}$$

当 $\nu_n = 0$ 时, $\Lambda = 1$, 此时由式 (6.4.7) 和式 (6.4.12) 就得到静态极化率:

$$\chi_0 = \frac{-2}{\beta} \sum_{r,\underline{p}} \frac{1}{\left(\mathrm{i}\tilde{\omega}_r - \varepsilon_{\underline{p}}\right)^2} = \frac{-2}{\beta} V \int \mathrm{d}\varepsilon N(\varepsilon) \sum_r \frac{1}{(\mathrm{i}\tilde{\omega}_r - \varepsilon)^2} \tag{6.4.18}$$

再利用泊松求和公式得:

$$\begin{aligned}
\chi_0 &= 2V\int \mathrm{d}\varepsilon N(\varepsilon)\int \frac{\mathrm{d}z}{2\pi\mathrm{i}}n_{\mathrm{F}}(z)\left\{\frac{1}{(z+\mathrm{i}/(2\tau)-\varepsilon)^2}-\frac{1}{[z-\mathrm{i}/(2\tau)-\varepsilon]^2}\right\}\\
&= 2V\int \mathrm{d}\varepsilon N(\varepsilon)\int \frac{\mathrm{d}z}{2\pi\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}n_{\mathrm{F}}(z)}{\mathrm{d}z}\left[\frac{1}{z+\mathrm{i}/(2\tau)-\varepsilon}-\frac{1}{z-\mathrm{i}/(2\tau)-\varepsilon}\right]\\
&= -2V\int \mathrm{d}z\frac{\mathrm{d}n_{\mathrm{F}}(z)}{\mathrm{d}z}\int\frac{\mathrm{d}\varepsilon}{2\pi}N(\varepsilon)\tilde{\rho}(\varepsilon)
\end{aligned}\tag{6.4.19}$$

其中, $\dfrac{\mathrm{d}n_{\mathrm{F}}(z)}{\mathrm{d}z}$ 几乎是一个负的 δ 函数; $\tilde{\rho}(\varepsilon)$ 是式 (5.3.24) 所定义的谱密度:

$$\tilde{\rho}(\varepsilon)=\mathrm{i}\left[g(\varepsilon+\mathrm{i}0^+)-\mathrm{h.c.}\right]\tag{6.4.20}$$

再利用谱密度的性质, 得

$$\chi_0=2VN(0)\tag{6.4.21}$$

故

$$\begin{aligned}
\chi_{nn}(\underline{q},\mathrm{i}\nu_n)=&\chi_0-\frac{2}{\beta}N(0)V\\
&\cdot\sum_r\int\mathrm{d}\varepsilon\left[g(\mathrm{i}\omega_r+\mathrm{i}\nu_n,\varepsilon)g(\mathrm{i}\omega_r,\varepsilon)\varLambda(\mathrm{i}\omega_r,\mathrm{i}\nu_n)-\{\nu_n\to 0\}\right]\\
=&\chi_0-\chi_0\frac{\nu_n}{\nu_n+\tau^{-1}}\frac{\tau^{-1}}{\nu_n+D\underline{q}^2}=\chi_0\frac{D\underline{q}^2}{\nu_n+D\underline{q}^2}
\end{aligned}\tag{6.4.22}$$

其中, 已假设了 $|\nu_n|\tau\ll 1$.

所以它的解析延拓为

$$\chi^{\mathrm{r}}_{nn}(\underline{q},\nu)\equiv\chi_{nn}(\underline{q},\nu+\mathrm{i}0^+)=\chi_0\frac{D\underline{q}^2}{D\underline{q}^2-\mathrm{i}\nu}\tag{6.4.23}$$

现在我们可以应用以上结果来导出纵向电导, 即对纵向电场 (满足 $\underline{q}\cdot\underline{E}\neq 0$) 的电流响应. 由于 $\underline{E}=-\boldsymbol{\nabla}\varphi$, 所以 $\mathrm{i}\underline{E}=\underline{q}\varphi$, 再利用式 (6.4.6), 以及 $\varphi(\underline{q})=\mathrm{i}\underline{E}\cdot\underline{q}/\underline{q}^2$, 可得

$$\delta n(\underline{q},\nu)=\frac{-e}{V}\chi^{\mathrm{r}}_{nn}(\underline{q},\nu)\phi(\underline{q})=\frac{-\mathrm{i}e}{V}\chi_0\frac{D\underline{q}\cdot\underline{E}}{D\underline{q}^2-\mathrm{i}\nu}\tag{6.4.24}$$

又因

$$\frac{\partial n}{\partial t}=\frac{\partial(n_0+\delta n)}{\partial t}=\frac{\partial\delta n}{\partial t}\to-\mathrm{i}\nu\delta n(\underline{q},\nu)=\frac{-e}{V}\chi_0\frac{D\nu\underline{q}\cdot\underline{E}(\underline{q})}{D\underline{q}^2-\mathrm{i}\nu}\tag{6.4.25}$$

对比

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}=-\boldsymbol{\nabla}\cdot\underline{j}\longrightarrow-\mathrm{i}\underline{q}\cdot\underline{j}(q)$$

其中, ρ 为电荷密度. 可得纵向电流

$$\underline{j}_{\mathrm{L}}(q)=\frac{e^2\chi_0 D}{V}\frac{\mathrm{i}\nu}{\mathrm{i}\nu-D\underline{q}^2}\underline{E} \tag{6.4.26}$$

及纵向电导

$$\sigma_{\mathrm{L}}(q)=\frac{e^2\chi_0 D}{V}\frac{\mathrm{i}\nu}{\mathrm{i}\nu-D\underline{q}^2} \tag{6.4.27}$$

由此可见**纵向电导**含有一个扩散极点. 进一步在 $\underline{q}=0$ 时, 可以得到**爱因斯坦关系式**:

$$\sigma_{\mathrm{L}}=\frac{e^2}{V}\chi_0 D \tag{6.4.28}$$

由于 $\chi_0=2VN(0)$, $D=v_{\mathrm{F}}^2\tau/3$, 所以利用式 (6.3.37) 得

$$\sigma_{\mathrm{L}}=\frac{ne^2}{m}\tau \tag{6.4.29}$$

二、弱局域化

电子局域化来自电子波间的相位干涉, 而无序就能在电子气内产生集体干涉效应. 无序度可通过无序参量 $\varDelta$ 来定义, 对于位置无序, $\varDelta$ 量度了相对于杂质之间的平均距离的概率分布的宽度. 而对于振幅无序, $\varDelta$ 量度了相对于能带宽度的概率分布.

散射波的相位干涉要求散射前后的波长保持相同, 这正是弹性散射的条件. 设 l_{el} 是电子的弹性平均自由程, 它在 $T=0$ 时是散射的唯一特征, 从而是 $\varDelta$ 和体系的维数 d 的函数: $l_{\mathrm{el}}=l_{\mathrm{el}}(\varDelta,d)$.

对于弱无序 $\varDelta$, $l_{\mathrm{el}}(\varDelta,d)\gg\lambda$(其中, $\lambda=2\pi/k_{\mathrm{F}}$ 是电子的波长). 此时电子将处于弱局域化情形. 弱局域化能对电导产生量子修正, 使得实际电导减小, 但它不足以完全限制住电子. 当 $\varDelta$ 如此之大使得 $l_{\mathrm{el}}(\varDelta,d)\simeq\lambda$ 时 ($l_{\mathrm{el}}(\varDelta,d)>\lambda$ 无意义), 波函数就将指数地衰减:

$$|\psi(\underline{x})|^2\propto \mathrm{e}^{-|\underline{x}|/\xi} \tag{6.4.30}$$

其中, $\xi=\xi(\varDelta,d)$ 是**局域化长度**. 这是强局域化情形. 从弱局域化到强局域化是**金属–绝缘体转变**(也称 Anderson 转变), 它由无序的临界值 $\varDelta_{\mathrm{c}}$ 表征. $\varDelta<\varDelta_{\mathrm{c}}$ 意味着弱局域化, 从而 $\xi=\infty$. (注意: 在二维和一维情形, 任何小量的无序都能产生弱局域化效应.)

现在来看弱局域化的形成机制. 当一个电子从起点出发通过若干散射格位到达某格位, 然后又沿着时间反演路径返回起点, 由于仍保留有相位记忆, 所以产生相长干涉. **弱局域化**就是作为一个往返扩散的两个轨道间的干涉的结果. 如图 6.4.1 所示.

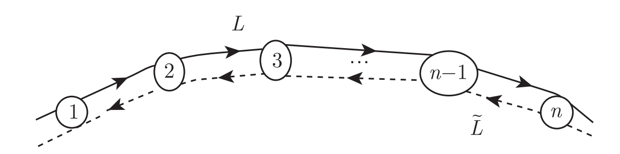


图 6.4.1　路径与时间反演路径

设电子首先沿着路径 L 通过了标记为 1 到 n 的一系列散射格位, 然后又沿着通过 n 到 1 的时间反演路径 $\tilde{L}$ 而回到原来位置. 通过路径 L 的散射振幅为

$$A_L = g^{\mathrm{r}}(n, n-1)g^{\mathrm{r}}(n-1, n-2)\cdots g^{\mathrm{r}}(2, 1) \tag{6.4.31}$$

其中, $g^{\mathrm{r}}(i, j)$ 代表电子从格位 j 到格位 i 的推迟传播子. 而通过对应的时间反演路径 $\tilde{L}$ 的振幅为

$$A_{\tilde{L}} = g^{\mathrm{r}}(1, 2)g^{\mathrm{r}}(2, 3)\cdots g^{\mathrm{r}}(n-1, n) \tag{6.4.32}$$

故通过这两条路径的总的概率应为

$$P = |A_L + A_{\tilde{L}}|^2 = |A_L|^2 + |A_{\tilde{L}}|^2 + A_L^* A_{\tilde{L}} + A_{\tilde{L}}^* A_L \tag{6.4.33}$$

其中, 右边最后两项正是干涉项. 由于这两条路径是互为时间反演的, 故有 $A_L = A_{\tilde{L}}$, 这样

$$P = 4|A_L|^2 \tag{6.4.34}$$

相反, 若不考虑干涉项的存在, 则总概率则只有 $2|A_L|^2$. 由此知道时间反演路径之间的相长干涉使得电子返回的概率倍增. 特别地, 我们将看到电子返回概率在低维 (一维及二维) 情形会扩大, 并导致即使是任意小的无序也会引起电子局域化.

注意到推迟传播子和超前传播子有如下共轭关系 (参见式 (4.2.13)):

$$g^{\mathrm{r}}(i, j)^* = g^{\mathrm{a}}(j, i) \tag{6.4.35}$$

故可以将式 (6.4.33) 中的干涉项 $A_{\tilde{L}}^* A_L$ 写成

$$A_{\tilde{L}}^* A_L = \prod_{m=1}^{n-1} g^{\mathrm{a}}(m+1, m)g^{\mathrm{r}}(m+1, m) \tag{6.4.36}$$

它可以用如下梯形图 (图 6.4.2) 来表示电子对的重复散射.

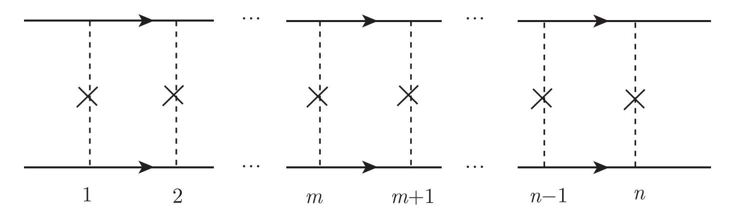


图 6.4.2　电子对重复散射的梯形图

图 6.4.2 中, 下面的粒子线涉及超前传播子 g^{a}, 上面的粒子线涉及推迟传播子 g^{r}. 所有这类图的和称为 “Cooperon”, 这是因为这种图的反转首先用在讨论超导性. 让下面的粒子线作离开平面的旋转后就等价于所谓**最大交叉图**(或称为 “Langer_Neal 图”). 如图 6.4.3 所示.

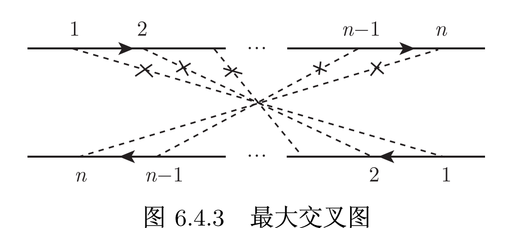


图 6.4.3　最大交叉图

由此可以看出, 正是这种过去所忽略的交叉图将贡献给电子的弱局域化.

现在我们来计算这种弱局域化效应对电导的修正量. 在松原表象中, 这种修正量的费曼图如图 6.4.4 所示. 除第一图外其余所有图均是最大交叉图.

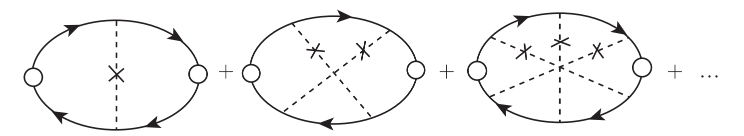


图 6.4.4　电导的弱局域化修正的费曼图

我们在以前讨论扩散电荷涨落时, 只与梯形图发生联系, 为了利用前面的结果, 可采用如下方法: 将右端的两根线作离开平面的旋转, 就会得到一个被扭转了的但有梯形图部分的图形, 如图 6.4.5 所示.

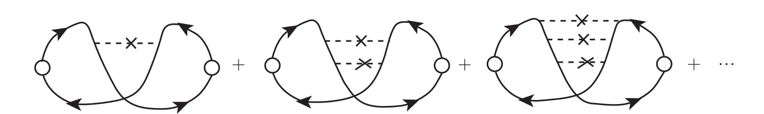


图 6.4.5　图 6.4.4 发生扭转后的图

这种图形中的梯形图的和记为 $\varGamma$:

$\varGamma(q) =$ 　+　（p, $-p+q$）　+　（p, p', $-p+q$, $-p'+q$）　+ $\cdots$

$= \quad q$　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　(6.4.37)

其中, 对比式 (6.4.7) 中的梯形图可知, 下面的线不是空穴线而改成了粒子线, 故将原来的 $p+q$ 改成了 $-p+q$. 由式 (6.4.37) 知

$$\Gamma(q)=CV_0^2+CV_0^2\sum_{\underline{p}}g^{\mathrm{r}}(p)g^{\mathrm{a}}(-p+q)\Gamma(q) \tag{6.4.38}$$

式中, $g^{\mathrm{r}}(p)\equiv g(\underline{p},\mathrm{i}\omega_r^+)$, $g^{\mathrm{a}}(p)\equiv g(\underline{p},\mathrm{i}\omega_r)$ 和式 (6.3.33) 中一样, 其中, $\omega_r^+\equiv\omega_r+\nu_n$, $\nu_n>0$, 并且设 ω_r^+ 与 ω_r 有相反符号.

令

$$\Pi_{\mathrm{c}}(q)=CV_0^2\sum_{\underline{p}}g^{\mathrm{r}}(p)g^{\mathrm{a}}(-p+q) \tag{6.4.39}$$

代入式 (6.4.38) 得

$$\Gamma(q)=CV_0^2/[1-\Pi_{\mathrm{c}}(q)] \tag{6.4.40}$$

注意到除了空穴线被替代为电子线外, Π_{c} 与扩散电荷涨落中的粒子–空穴胞相同, 这种替代相当于使传播子的动量作变换 $\underline{p}+\underline{q}\to-\underline{p}+\underline{q}$, 由于时间反演对称性成立, 从而这些改变不影响计算结果, 所以可引用前面的结果 (参见式 (6.4.15)).

$$\Pi_{\mathrm{c}}(q)=1-\nu_n\tau-D\underline{q}^2\tau+\cdots \tag{6.4.41}$$

代入式 (6.4.41) 中得 (对于 $\nu_n<0$ 情形, 可以类似处理)

$$\Gamma(q)=\frac{CV_0^2}{|\nu_n|+D\underline{q}^2}\tau^{-1}=\frac{1}{2\pi N(0)\tau^2(|\nu_n|+D\underline{q}^2)} \tag{6.4.42}$$

现在我们利用式 (6.4.37) 重新画图, 如图 6.4.6 所示.

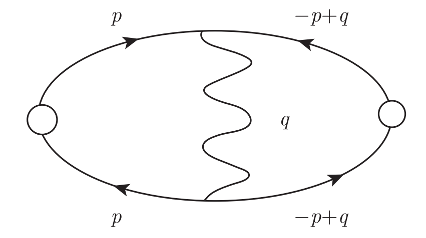


图 6.4.6　等价于图 6.4.4 的图

由此可得弱局域化对电导的贡献为

$$\begin{aligned}\Delta\sigma^{ab}(\mathrm{i}\nu_n)=&\frac{2e^2}{\nu_nV\beta}\sum_{p,\underline{q}}v_{\underline{p}}^a v_{-\underline{p}+\underline{q}}^b\\&\cdot[\Gamma(q)g^{\mathrm{r}}(p)g^{\mathrm{a}}(p)g^{\mathrm{r}}(-p+q)g^{\mathrm{a}}(-p+q)+\{\mathrm{i}\nu_n\to0\}]\end{aligned}$$

与前面一样, 为了提高局域化的最奇异的长距离效应, 可忽略传导电子线对 q 的平滑的依赖来达到简化的目的. 这样, 令沿电子线的 $q=0$. 从而有

$$\Delta\sigma^{ab}(\mathrm{i}\nu_n)=\frac{2e^2}{\nu_n V\beta}\sum_{\underline{q}}\Gamma(q)\sum_{\underline{p},r}v_{\underline{p}}^a v_{-\underline{p}+\underline{q}}^b\left[g^{\mathrm{r}}(p)^2 g^{\mathrm{a}}(p)^2-\{\mathrm{i}\nu_n\to 0\}\right]$$

再利用式 (6.3.32)~ 式 (6.3.37) 中的类似处理方法, 可得

$$\Delta\sigma^{ab}(\mathrm{i}\nu_n)=-\delta^{ab}\frac{ne^2}{m}\frac{1}{2\pi N(0)\tau^2}\int\frac{\mathrm{d}^d q}{(2\pi)^d}\frac{1}{|\nu_n|+D\underline{q}^2}\int\frac{\mathrm{d}\varepsilon}{2\pi}g^{\mathrm{r}}(\varepsilon)^2 g^{\mathrm{a}}(\varepsilon)^2 \tag{6.4.43}$$

对于右端的动量积分, 需要确定积分限. 我们用弹性散射速率 τ^{-1} 满足的条件来设定上限, 即 $D\underline{q}^2=\tau^{-1}$, 由此知 $\underline{q}_{\mathrm{up}}^2=(D\tau)^{-1}$. 对于积分下限, 或者取 $|\underline{q}|=L^{-1}$(其中, L 是体系的尺度), 此时 $D\underline{q}^2=DL^{-2}$; 或者利用非弹性散射速率 τ_i^{-1}. 令 $\tau_0^{-1}=\max\left(\tau_i^{-1},DL^{-2}\right)$, 这样可取积分下限满足 $\underline{q}_{\mathrm{dn}}^2=(D\tau_0)^{-1}$. 故动量积分 (在作解析延拓 $\mathrm{i}\nu_n\to\nu+\mathrm{i}0^+$ 后) 为

$$I\equiv\int_{(D\tau_0)^{-1/2}}^{(D\tau)^{-1/2}}\frac{\mathrm{d}^d q}{(2\pi)^d}\frac{1}{D\underline{q}^2+|\nu_n|} \tag{6.4.44}$$

为了计算式 (6.4.43) 右端中的能量积分, 我们利用

$$\int\frac{\mathrm{d}z}{2\pi}\frac{1}{(z-\mathrm{i}a)^2}\frac{1}{(z+\mathrm{i}b)^2}=\frac{2}{(a+b)^3}\quad(a,b>0)$$

上式容易利用残数定理验证. 由此在静态情形, 可得

$$\int\frac{\mathrm{d}\varepsilon}{2\pi}g^{\mathrm{r}}(\varepsilon)^2 g^{\mathrm{a}}(\varepsilon)^2=2\tau^3$$

故

$$\Delta\sigma^{ab}(\nu)=-\delta^{ab}\frac{ne^2\tau}{m}\frac{1}{2\pi N(0)}I \tag{6.4.45}$$

显然, 积分 I 依赖于维数 d. 当 $d\geqslant 3$ 时, I 是一个有限值, 弱局域化将对 Drude 电导作一个微扰修正. 但在 $d\leqslant 2$ 时, 弱局域化修正将远为强烈. 在无相互作用体系, 它仅由频率或体系的有限尺度 L 所截断. 在二维静态情形, 有

$$I=\frac{1}{4\pi D}\ln\frac{\tau_0}{\tau}$$

这样, 对静态电导的局域化修正为

$$\Delta\sigma=-\frac{ne^2\tau}{m}\frac{1}{8\pi^2 N(0)D}\ln\frac{\tau_0}{\tau}$$

式中, 恢复普朗克常量 $\hbar$ 并利用替换 $n\tau/m \to 2N(\varepsilon_{\mathrm{F}})D$, 则有

$$\Delta\sigma = -\frac{1}{2\pi^2}\frac{e^2}{\hbar}\ln\frac{\tau_0}{\tau} \tag{6.4.46}$$

其中, $e^2/\hbar$ 称为**普适电导**.

如果作替代 $2\pi N(0)D = p_{\mathrm{F}}l/2$(其中, $l = v_{\mathrm{F}}\tau$), 则

$$\Delta\sigma = -\frac{ne^2\tau}{m}\frac{1}{2\pi p_{\mathrm{F}}l}\ln\frac{\tau_0}{\tau} = -\frac{ne^2\tau}{m}\frac{1}{\pi p_{\mathrm{F}}l}\ln\frac{L}{l} \tag{6.4.47}$$

我们可以得出如下结论:

(1) 这正好验证了本章第三节第一小节末所说的交叉图对电导的修正的量级是 $0(1/(p_{\mathrm{F}}l))$ 的结论.

(2) 当样品长度等于 $L \sim l\mathrm{e}^{p_{\mathrm{F}}l} \approx L_{\mathrm{c}}$(局域化长度) 时, 电导率成为 $e^2/\hbar$ 的量级 $\left(\sim 0.1\mathrm{k}\Omega^{-1}\right)$ 而与相互作用的强度无关. 由于二维时电阻率与电阻量纲相同, 所以它的电阻总是 $10\mathrm{k}\Omega$ 的量级.

(3) 由式 (6.4.47) 可以看出, $L > l$ 时 $\Delta\sigma$ 为负, 这意味着总电导减小, L 越大减小越多. 当 L 大到 $L = L_{\mathrm{c}}$ 时, $\sigma_0 + \Delta\sigma = 0$, 样品就演化成为绝缘体.

在局域化的标度行为中, $d_{\mathrm{c}} = 2$ 是一个临界维数, 而描述其对维数的跨越行为的最简洁的方式是采用所谓 “重整化群” 方案, 我们以后再予以讨论 (参见第八章第四节).

第五节　自旋轨道耦合

自旋轨道耦合作用 (SO 互作用) 是指粒子的自旋角动量与轨道角动量之间的耦合. SO 互作用可以有一个电磁的起源, 如原子中的 SO 互作用. 但 SO 互作用也可以没有电磁的起源, 因为基本粒子可以有强相互作用、弱相互作用等. 一个直接的例子由核子给出, 核子之间通过 π 介子场和 ρ 介子场而相互作用并显示出显著的 SO 互作用. 但以下我们不考虑这种非电磁起源的情形.

在半导体输运中, 电磁场与电荷及自旋间存在四种相互作用, 如图 6.5.1 所示.

电荷 ← 库仑力 ($\underline{F}=q\underline{E}$) ← 电场 → SO互作用 → (运动)自旋

(运动)电荷 ← 洛伦兹力 ($\underline{F}=q\underline{v}\times\underline{B}$) ← 磁场 → 塞曼效应 ($\underline{F}=\boldsymbol{\nabla}(\underline{M}\cdot\underline{B})$) → 自旋

图 6.5.1　电磁场与电荷及自旋间的相互作用

电子参与电磁相互作用, 这时 SO 互作用是作为对薛定谔方程的相对论修正而出现的, 它是狄拉克相对论性电子理论的必然结果. 可以用两种等价的观点来理解 SO 互作用:

(1) 由于运动的相对性, 电子看到原子核 (或原子实) 的电流, 这个电流产生的磁场与电子自旋磁矩作用.

(2) 电子以速度 $\underline{v}$ 通过原子核 (或原子实) 产生电场 $\underline{E}$ 时, 由洛伦兹变换知, 电子将看到一个正比于 $\underline{v}\times\underline{E}$ 的磁场, 从而电子的磁矩受到其作用.

根据狄拉克理论 (参见附录 6B), SO 互作用哈密顿为

$$\hat{H}_{\mathrm{SO}}=\frac{-e}{4m}\hat{\underline{\sigma}}\cdot(\hat{\underline{v}}\times\underline{E}) \tag{6.5.1}$$

它描述了电场 $\underline{E}$ 对一个运动自旋 $\hat{\underline{S}}=\hat{\underline{\sigma}}/2$ 的作用.

设体系的势能为 $V(\underline{r})$, 它生成的平均电场为 $\underline{E}$, 则 $-e\underline{E}=-\boldsymbol{\nabla}V(\underline{r})$, 将 $\underline{E}=\boldsymbol{\nabla}V(\underline{r})/e$ 及 $\hat{\underline{v}}=\hat{\underline{p}}/m$ 代入式 (6.5.1), 则其右端成为

$$\frac{-1}{4m^2}\hat{\underline{\sigma}}\cdot[\hat{\underline{p}}\times\boldsymbol{\nabla}V(\underline{r})] \tag{6.5.2}$$

但考虑到 $\hat{\underline{p}}$ 与 $\underline{r}$ 的不对易性, 为了使 $\hat{H}_{\mathrm{SO}}$ 成为厄米算符, 将式 (6.5.2) 厄米化. 为此注意到任意厄米算符 $\hat{\underline{A}}$ 和 $\hat{\underline{B}}$ 满足如下关系: $(\hat{\underline{A}}\times\hat{\underline{B}})^{\dagger}=-\hat{\underline{B}}\times\hat{\underline{A}}$, 得

$$\hat{H}_{\mathrm{SO}}=\frac{-1}{8m^2}\left\{\hat{\underline{\sigma}}\cdot[\hat{\underline{p}}\times\boldsymbol{\nabla}V(\underline{r})]-\hat{\underline{\sigma}}\cdot[\boldsymbol{\nabla}V(\underline{r})\times\hat{\underline{p}}]\right\} \tag{6.5.3}$$

显然 SO 互作用依赖于 $V(\underline{r})$ 的形式, 因此 SO 互作用的具体形式由体系对称性要求所支配. 这就导致各种不同的自旋轨道耦合项, 下面列出常见的几种.

(一) Thomas 自旋轨道耦合项

当势 $V(\underline{r})$ 有球对称时, $V(\underline{r})=V(|\underline{r}|)$. 则 $\boldsymbol{\nabla}V(\underline{r})=\dfrac{\underline{r}}{r}\dfrac{\mathrm{d}V(\underline{r})}{\mathrm{d}r}$. 同时注意到轨道角动量 $\hat{\underline{L}}\equiv\underline{r}\times\hat{\underline{p}}$ 是与 r 无关的 (它只与 θ,φ 有关), 即 $\hat{\underline{L}}$ 与 r 的函数对易. 这样式 (6.5.3) 就可以简化为

$$\hat{H}_{\mathrm{Tomas}}=\frac{1}{2m^2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V(\underline{r})}{\mathrm{d}r}\hat{\underline{S}}\cdot\hat{\underline{L}} \tag{6.5.4}$$

这就是著名的 Thomas 自旋轨道耦合项.

(二) Rashba 自旋轨道耦合项

在某些三维晶体中, 有几种典型的自旋轨道耦合, 一种是所谓的 Rashba 耦合.

$$\hat{H}_{\mathrm{R}}=\hat{y}\cdot\alpha(\hat{\underline{\sigma}}\times\hat{\underline{p}}) \tag{6.5.5}$$

其中, $\hat{y}$ 是 y 方向上的单位矢量; α 是 Rashba 耦合系数. Rashba 耦合项在六角 A_2B_6 晶体 (铅锌矿结构) 中是典型的 (角标 2,6 代表元素的族).

用固体理论中的 $\underline{k}\cdot\underline{p}$ 近似方法, 根据晶体的对称性 (点群类型), 可以导出式 (6.5.5). 式 (6.5.5) 在 $\underline{k}\sim\underline{p}$ 上是线性的, 它是 $\underline{k}\cdot\underline{p}$ 理论中的主导项. 特别是空间上的限制能降低体系的对称性, 从而使得 $\underline{k}$ 的线性项一般会出现. 例如, 通过受限体系的非对称性或外部应变来产生及控制 H_{R}, 即由结构反演不对称性而产生 SO 有效哈密顿.

一个典型的且意义巨大的例子是二维电子气 (2DEG), 它由于受限势引起的结构反演不对称性所导致的 Rashba 耦合可由外电压 (或栅压) 进行调制.

图 6.5.2 给出了结构反演不对称性的示意图, 这正如在一个调制掺杂的异质结构体系的导带中的一部分侧面图所显示的那样.

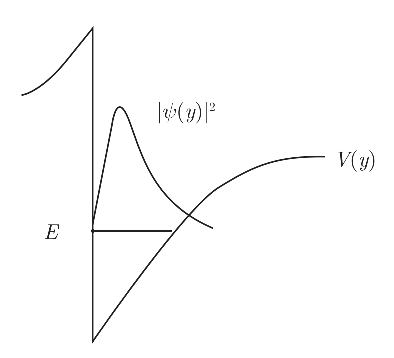


图 6.5.2　结构反演不对称性示意图

考虑一个由 2DEG 构成的装置, 其中, 电子在 y 方向被受限势 $V(y)$ 强烈地限制, 使得 $\dfrac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}y}\gg\dfrac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x},\dfrac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}z}$, 这样 $\boldsymbol{\nabla}V(\underline{r})\approx\hat{y}\dfrac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}y}$, 也就是生成的平均电场沿 y 方向. 进一步设 $V(y)$ 对于反射点 $y=0$ 是不对称的, 这样 $\dfrac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}y}$ 对 y 方向上的基本束缚态 $|\psi(y)\rangle$ 的矩阵元有 $\langle\psi(y)|\dfrac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}y}|\psi(y)\rangle\neq 0$. 在这种条件下, SO 互作用的一般表达式 (6.5.3) 就可以约化成 Rashba SO 互作用的形式:

$$\hat{H}_{\mathrm{R}}=\frac{\hat{y}}{2}\cdot\left[\alpha(\hat{\underline{\sigma}}\times\hat{\underline{p}})+(\hat{\underline{\sigma}}\times\hat{\underline{p}})\alpha\right] \tag{6.5.6}$$

其中, $\alpha\sim\langle\psi(y)|\dfrac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}y}|\psi(y)\rangle$ 是 Rashba 耦合系数, 量级为 $(1\sim 10)\times 10^{-10}\mathrm{eV}\cdot\mathrm{cm}$.

注意的是:

(1) 在垂直于 2DEG 方向 (即 y 方向) 上的受限势必须是不对称的, 否则 $\alpha=0$, 从而没有 Rashba SO 互作用.

事实上, 若 $V(y)=V(-y)$, 则因反演对称性, y 方向上的基本束缚解 $\psi(y)$ 将有确定的宇称, 从而 $\psi(-y)=\pm\psi(y)$, 故 $|\psi(-y)|^2=|\psi(y)|^2$.

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{0}\mathrm{d}y\psi^*(y)\frac{\mathrm{d}V(y)}{\mathrm{d}y}\psi(y)&=-\int_{-\infty}^{0}\mathrm{d}y\psi^*(-y)\frac{\mathrm{d}V(-y)}{\mathrm{d}(-y)}\psi(-y)\\&=\int_{0}^{\infty}\mathrm{d}y|\psi(y)|^2\left(-\frac{\mathrm{d}V(y)}{\mathrm{d}y}\right)\Rightarrow\end{aligned}$$

$$\alpha\sim\langle\psi(y)|\frac{\mathrm{d}V(y)}{\mathrm{d}y}|\psi(y)\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}y\psi^*(y)\frac{\mathrm{d}V(y)}{\mathrm{d}y}\psi(y)=0$$

(2) Rashba 互作用强度在实验中可由外电场或栅压调制.

(3) 式 (6.5.6) 右端方括号内的两项一般并不相等. 因为原则上 α 可以依赖于坐标 (如 x). 因此 $\underline{\hat{p}}\alpha(x)\neq\alpha(x)\underline{\hat{p}}$. 例如, 当 α 在图 6.5.3 中的金属–量子点–金属装置的界面处剧烈变化时就发生这种情形.

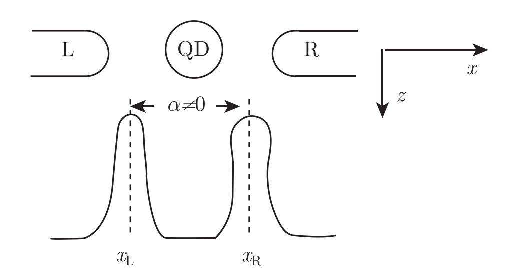


图 6.5.3　金属–量子点–金属装置

其中, L, R 分别代表与量子点相连接的左右金属引线

(三) Dresselhaus 自旋轨道耦合项

出现在某些三维晶体中的另一种典型的自旋轨道耦合就是 Dresselhaus 耦合 (或 Dresselhaus 3D 项).

$$\hat{H}_{\mathrm{D}}^{(3\mathrm{D})}=\beta_{3\mathrm{D}}(\underline{\hat{\sigma}}\cdot\underline{\hat{K}})\tag{6.5.7}$$

其中

$$\begin{cases}\hat{K}_z=\hat{k}_z(\hat{k}_x^2-\hat{k}_y^2)\\\hat{K}_y=\hat{k}_y(\hat{k}_z^2-\hat{k}_x^2)\\\hat{K}_x=\hat{k}_x(\hat{k}_y^2-\hat{k}_z^2)\end{cases}$$

$H_{\mathrm{D}}^{(3\mathrm{D})}$ 项在立方 A_3B_5 晶体中是典型的. 例如, 它出现在闪锌矿结构半导体等的体材料导带的有效哈密顿中. 它是这类材料具有中心反演不对称性 (或体反演不对称性) 的结果.

第六节　有 Rashba 耦合的纳米结构的自旋输运

一、结构及其哈密顿

考虑一个修改了的 Aharnov-Bohm(AB) 环, 如图 6.6.1 所示. 一个 QD 位于环的一个手臂上, 在 QD 中存在 Rashba SO 互作用和电子–电子相互作用. 环的另一个臂无 Rashba SO 互作用. 环与两个 (非磁性) 金属引线相连并且有磁通 Φ 穿过 AB 环. 现在我们来研究这样一个装置的量子输运的性质. 为简单起见, 设 QD 仅有一个能级 ε_d.

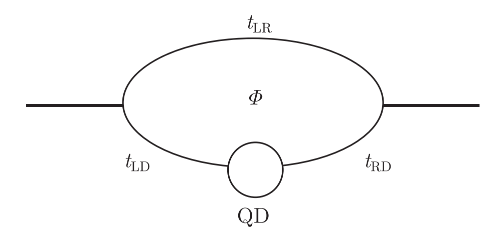


图 6.6.1　有一个 QD 的 AB 环

因 Rashba SO 互作用哈密顿可写成

$$\begin{aligned}\frac{\hat{y}}{2}\cdot\left[\alpha(x)(\underline{\hat{\sigma}}\times\underline{\hat{p}})+(\underline{\hat{\sigma}}\times\underline{\hat{p}})\alpha(x)\right]&=\frac{1}{2}\left[\alpha(x)\hat{\sigma}_z\hat{p}_x+\hat{\sigma}_z\hat{p}_x\alpha(x)\right]-\alpha(x)\hat{\sigma}_x\hat{p}_z\\&\equiv\hat{H}_{\rm R}^{(1)}+\hat{H}_{\rm R}^{(2)}\end{aligned}\tag{6.6.1}$$

对于沿着 x 轴方向的输运 (图 6.5.3), 这两项有着基本的区别: $\hat{H}_{\rm R}^{(1)}$ 会产生自旋的进动 (参见 Datt S, Das B. Appl. Phys. Lett., 1990, 56: 665), 而 $\hat{H}_{\rm R}^{(2)}$ 却不会产生这种进动, 这可间接由式 (6.6.8) 和式 (6.6.9) 看出.

当不考虑磁场时, 我们所考虑的体系的哈密顿为

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2}{2m^*}+\hat{V}(\underline{x})+\hat{V}_{\text{e-e}}+\hat{H}_{\rm R}^{(1)}+\hat{H}_{\rm R}^{(2)}\tag{6.6.2}$$

为了二次量子化方便, 引入如下幺正变换:

$$u(x)=\begin{cases}1 & (x<x_{\rm L})\\ \exp\left[-{\rm i}\hat{\sigma}_z\displaystyle\int_{x_{\rm L}}^{x}k_{\rm R}(x'){\rm d}x'\right] & (x_{\rm L}<x<x_{\rm R})\\ \exp\left[-{\rm i}\hat{\sigma}_z\displaystyle\int_{x_{\rm L}}^{x_{\rm R}}k_R(x'){\rm d}x'\right] & (x_{\rm R}<x)\end{cases}\tag{6.6.3}$$

其中, $k_{\mathrm{R}}(x)\equiv\alpha(x)m^*$, 并设当 $x_{\mathrm{R}}<x$ 或 $x<x_{\mathrm{L}}$ 时, $\alpha(x)=0$. 在这个幺正变换下, QD 原来的基底 $|\varphi\uparrow\rangle\sim\varphi(\underline{x})|\uparrow\rangle$, $|\varphi^*,\downarrow\rangle\sim\varphi^*(\underline{x})|\downarrow\rangle$ 将变换成

$$|\varphi\uparrow\rangle'\sim u(x)\varphi(\underline{x})|\uparrow\rangle=\exp\left[-\mathrm{i}\int_{x_{\mathrm{L}}}^{x}k_{\mathrm{R}}(x')\mathrm{d}x'\right]\varphi(\underline{x})\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\tag{6.6.4}$$

$$|\varphi^*\downarrow\rangle'\sim u(x)\varphi^*(\underline{x})|\downarrow\rangle=\exp\left[\mathrm{i}\int_{x_{\mathrm{L}}}^{x}k_{\mathrm{R}}(x')\mathrm{d}x'\right]\varphi^*(\underline{x})\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\tag{6.6.5}$$

在幺正变换 (6.6.3) 下, 原哈密顿变成 $\hat{H}'=u^+(x)\hat{H}u(x)$. 利用

$$[\hat{p}_x,u(x)]=-\hat{\sigma}_z k_{\mathrm{R}}(x)u(x),\quad [u^+(x),\hat{p}_x]=-\hat{\sigma}_z k_{\mathrm{R}}(x)u^+(x)\tag{6.6.6}$$

可以得出

$$\hat{H}'=\frac{\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2}{2m^*}+\hat{V}(x)+\hat{V}_{\text{e-e}}-\frac{k_{\mathrm{R}}^2}{2m^*}+\hat{H}'^{(2)}_{\mathrm{R}}\tag{6.6.7}$$

其中, $\hat{H}'^{(2)}_{\mathrm{R}}=u^+(x)\hat{H}^{(2)}_{\mathrm{R}}u(x)$.

现在我们利用新基底式 (6.6.4) 和式 (6.6.5) 来对 $\hat{H}'$ 实施二次量子化, 并且还要考虑垂直穿过环的磁通的作用. 以下为简单起见, 我们还假设 $\alpha(x)$ 与 x 无关从而 $k_{\mathrm{R}}(x)$ 与 x 无关 (但即使它们与 x 有关, 所有结果都一样). 首先注意到

$$\langle\varphi^*\sigma|\hat{H}'^{(2)}_{\mathrm{R}}|\varphi\sigma\rangle'=0\tag{6.6.8}$$

因

$$\begin{aligned}\langle\varphi^*\downarrow|\hat{H}'^{(2)}_{\mathrm{R}}|\varphi\uparrow\rangle'&=\frac{-k_{\mathrm{R}}}{m^*}\int\mathrm{d}\underline{x}\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}k_{\mathrm{R}}x}\varphi(\underline{x})\hat{p}_z\varphi(\underline{x})\\&=\frac{k_{\mathrm{R}}}{m^*}\int\mathrm{d}\underline{x}\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}k_{\mathrm{R}}x}\varphi(\underline{x})\hat{p}_z\varphi(\underline{x})\end{aligned}$$

上式最后一步使用了分部积分法. 故

$$\begin{aligned}&\langle\varphi^*\downarrow|\hat{H}'^{(2)}_{\mathrm{R}}|\varphi\uparrow\rangle'=0\\&\cdots\end{aligned}\tag{6.6.9}$$

可知二次量子化表述中可忽略 $\hat{H}'^{(2)}_{\mathrm{R}}$. 这是因为我们已假设了 QD 是单能级, 如果 QD 有多重能级, 则不能忽略 $\hat{H}'^{(2)}_{\mathrm{R}}$ 了. Rashba SO 互作用能在不同能级之间引起自旋翻转, 但不能引起相同能级内的自旋翻转.

现在不难写出该体系哈密顿的二次量子化形式了, 它 (仍然用符号 $\hat{H}$ 表示) 可以写成

$$\hat{H}=\sum_{\beta,k,\sigma}\varepsilon_{\beta k}\hat{c}^+_{\beta k\sigma}\hat{c}_{\beta k\sigma}+\sum_{\sigma}\varepsilon_d\hat{d}^+_\sigma\hat{d}_\sigma+U\hat{d}^+_\uparrow\hat{d}_\uparrow\hat{d}^+_\downarrow\hat{d}_\downarrow$$

$$+\sum_{k,\sigma} t_{\text{LR}}\left(\hat{c}^{+}_{\text{L}k\sigma}\hat{c}_{\text{R}k\sigma}+\text{h.c.}\right)$$
$$+\sum_{k,\sigma}\left(t_{\text{L}d}\hat{c}^{+}_{\text{L}k\sigma}\hat{d}_{\sigma}+t_{\text{R}d}\text{e}^{-\text{i}\sigma k_{\text{R}}L}\text{e}^{\text{i}\phi}\hat{c}^{+}_{\text{R}k\sigma}\hat{d}_{\sigma}+\text{h.c.}\right) \tag{6.6.10}$$

其中, 右端第一项描述了左右金属引线 ($\beta=\text{L},\text{R}$); 第二项描述了有单一能级的 QD; 第三项是 QD 中电子–电子间的库仑作用, U 代表了恒定的作用强度; 第四项描述了通过环中无 QD 的那个臂的迁徙, t_{LR} 反映了左右引线的直接耦合强度; 第五项反映了左右引线和 QD 之间的耦合. 由于 Rashba SO 相互作用 (通过新基底函数的作用), 在迁徙矩阵元 $t_{\text{R}d}$ 那里出现与自旋有关的相因子 $\text{e}^{-\text{i}\sigma k_{\text{R}}L}$. 此外, 由于磁通 $\varPhi$ 的存在, 产生出一个在 AB 效应中出现的与自旋无关的著名的相因子 $\text{e}^{\text{i}\varphi}$, 其中, $\phi=2\pi\varPhi/\varPhi_0$.

二、有 Rashba 耦合的 AB 环的输运性质

下面将应用 Keldysh 非平衡格林函数方法来计算所讨论体系中的电流. 从左边引线流进 AB 环的电荷流可以从左引线的粒子占有数算符的时间演化来计算.

$$I_{\text{L}\sigma}=-e\left\langle\frac{\partial\hat{N}_{\text{L}\sigma}}{\partial t}\right\rangle=-\text{i}e\langle[\hat{H},\hat{N}_{\text{L}\sigma}]\rangle \tag{6.6.11}$$

其中

$$\hat{N}_{\text{L}\sigma}=\sum_{k}\hat{c}^{+}_{\text{L}k\sigma}\hat{c}_{\text{L}k\sigma} \tag{6.6.12}$$

$\hat{H}$ 是式 (6.6.10) 所给出的哈密顿, 该式右端前三项分别与 $\hat{N}_{\text{L}\sigma}$ 对易. 将式 (6.6.10) 代入式 (6.6.11) 易得

$$\begin{aligned}I_{\text{L}\sigma}=&\text{i}e\sum_{k}\Big[t_{\text{L}d}\langle\hat{c}^{+}_{\text{L}k\sigma}\hat{d}_{\sigma}\rangle-t^{*}_{\text{L}d}\langle\hat{d}^{+}_{\sigma}\hat{c}_{\text{L}k\sigma}\rangle\\&+t_{\text{LR}}\langle\hat{c}^{+}_{\text{L}k\sigma}\hat{c}_{\text{R}k\sigma}\rangle-t^{*}_{\text{LR}}\langle\hat{c}^{+}_{\text{R}k\sigma}\hat{c}_{\text{L}k\sigma}\rangle\Big]\end{aligned} \tag{6.6.13}$$

令小于格林函数为

$$G^{<}_{\text{L}d\sigma}(t,t')=\text{i}\left\langle\sum_{k}\hat{c}^{+}_{\text{L}k\sigma}(t')\hat{d}_{\sigma}(t)\right\rangle \tag{6.6.14}$$

$$G^{<}_{\text{LR}\sigma}(t,t')=\text{i}\left\langle\sum_{k}\hat{c}^{+}_{\text{L}k\sigma}(t')\hat{c}_{\text{R}k\sigma}(t)\right\rangle \tag{6.6.15}$$

注意到 $\left(\text{i}t_{\text{L}d}\langle\hat{c}^{+}_{\text{L}k\sigma}\hat{d}_{\sigma}\rangle\right)^{*}=-\text{i}t^{*}_{\text{L}d}\langle\hat{d}^{+}_{\sigma}\hat{c}_{\text{L}k\sigma}\rangle$, 则电流可写为

$$I_{\text{L}\sigma}=2e\text{Re}\left[t_{\text{L}d}G^{<}_{\text{L}d\sigma}(t,t)+t_{\text{LR}}G^{<}_{\text{LR}\sigma}(t,t)\right] \tag{6.6.16}$$

利用小于格林函数 $G^<(t,t)$ 的傅里叶变换 $G^<(\omega)$, 有

$$G^<(t,t) = G^<(t-t) = \int \frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t)} G^<(\omega)$$

则上式可以写成

$$I_{\mathrm{L}\sigma} = 2e \int \frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi} \mathrm{Re}\left[t_{\mathrm{L}d} G^<_{\mathrm{L}d\sigma}(\omega) + t_{\mathrm{LR}} G^<_{\mathrm{LR}\sigma}(\omega)\right] \tag{6.6.17}$$

为了计算 $G^<$, 我们首先计算推迟格林函数 G^{r}, 它满足如下 Dyson 方程 (参见式 (4.4.19)):

$$G^{\mathrm{r}}_\sigma = G^{(0)\mathrm{r}}_\sigma + G^{(0)\mathrm{r}}_\sigma \Sigma^{\mathrm{r}}_\sigma G^{\mathrm{r}}_\sigma \tag{6.6.18}$$

即

$$G^{\mathrm{r}}_\sigma = \frac{1}{\left[G^{(0)\mathrm{r}}_\sigma\right]^{-1} - \Sigma^{\mathrm{r}}_\sigma} \tag{6.6.19}$$

其中, $G^{(0)\mathrm{r}}_\sigma$ 是在引线和 AB 环之间无任何耦合时 (即 $t_{\mathrm{L}d} = t_{\mathrm{R}d} = t_{\mathrm{L}R} = 0$) 体系的格林函数, 且有

$$G^{\mathrm{r}}_\sigma = \begin{pmatrix} G^{\mathrm{r}}_{\mathrm{LL}\sigma} & G^{\mathrm{r}}_{\mathrm{LR}\sigma} & G^{\mathrm{r}}_{\mathrm{L}d\sigma} \\ G^{\mathrm{r}}_{\mathrm{RL}\sigma} & G^{r}_{\mathrm{RR}\sigma} & G^{\mathrm{r}}_{\mathrm{R}d\sigma} \\ G^{\mathrm{r}}_{d\mathrm{L}\sigma} & G^{\mathrm{r}}_{d\mathrm{R}\sigma} & G^{\mathrm{r}}_{dd\sigma} \end{pmatrix} \tag{6.6.20}$$

$$G^{(0)\mathrm{r}}_\sigma(\omega) = \begin{pmatrix} -\mathrm{i}\pi\rho & 0 & 0 \\ 0 & -\mathrm{i}\pi\rho & 0 \\ 0 & 0 & G^{(0)\mathrm{r}}_{dd\sigma}(\omega) \end{pmatrix} \tag{6.6.21}$$

其中, ρ 是引线的态密度, $\rho = -\mathrm{Im}G^{(0)\mathrm{r}}/\pi$, 且有 (参见第五章第六节)

$$G^{(0)\mathrm{r}}_{dd\sigma}(\omega) = \frac{\omega - \varepsilon_d - U + U n_{\bar\sigma}}{(\omega - \varepsilon_d)(\omega - \varepsilon_d - U)} \tag{6.6.22}$$

式中, $n_{\bar\sigma}$ 是量子点中在态 $\bar\sigma$ 处的电子占有数.

在宽带近似下可以将自能近似地写成

$$\Sigma^{\mathrm{r}}_\sigma(\omega) = \begin{pmatrix} 0 & t_{\mathrm{LR}} & t_{\mathrm{L}d} \\ t^*_{\mathrm{LR}} & 0 & \tilde t_{\mathrm{R}d\sigma} \\ t^*_{\mathrm{Ld}} & \tilde t^*_{\mathrm{R}d\sigma} & 0 \end{pmatrix} \tag{6.6.23}$$

其中, $\tilde t_{\mathrm{R}d\sigma} = t_{\mathrm{R}d} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\sigma k_{\mathrm{R}} L} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}$. 虽然这个方法不是精确的, 但当温度较高从而关联效应较小时却是一个较好的近似.

一旦求得推迟格林函数 G^{r} 后, 就可以从 Keldysh 方程 (式 (4.4.22)) 得到 $G^{<}(\omega)$.

$$G_{\sigma}^{<}=(1+G_{\sigma}^{\mathrm{r}}\varSigma_{\sigma}^{\mathrm{r}})G_{\sigma}^{(0)<}(1+\varSigma_{\sigma}^{\mathrm{a}}G_{\sigma}^{\mathrm{a}})+G_{\sigma}^{\mathrm{r}}\varSigma_{\sigma}^{<}G_{\sigma}^{\mathrm{a}}$$

再利用 Dyson 方程得

$$G_{\sigma}^{<}=G_{\sigma}^{\mathrm{r}}\left(G_{\sigma}^{(0)r}\right)^{-1}G_{\sigma}^{(0)<}\left(G_{\sigma}^{(0)a}\right)^{-1}G_{\sigma}^{\mathrm{a}}+G_{\sigma}^{r}\varSigma_{\sigma}^{<}G_{\sigma}^{\mathrm{a}} \tag{6.6.24}$$

就我们所讨论的情形而言, 有

$$\varSigma_{\sigma}^{<}=0 \tag{6.6.25}$$

且 $\left(G_{\sigma}^{(0)\mathrm{r}}\right)^{-1}G_{\sigma}^{(0)<}\left(G_{\sigma}^{(0)a}\right)^{-1}$ 是对角的. 其中

$$\left(G_{\beta\beta\sigma}^{(0)\mathrm{r}}\right)^{-1}G_{\beta\beta\sigma}^{(0)<}\left(G_{\beta\beta\sigma}^{(0)\mathrm{a}}\right)^{-1}=\frac{2\mathrm{i}n_{\mathrm{F}}(\omega-\mu)}{\pi\rho}\quad(\beta=\mathrm{L},\mathrm{R}) \tag{6.6.26}$$

式中, $n_{\mathrm{F}}(\omega-\mu)$ 为费米分布函数.

$$\left(G_{dd\sigma}^{(0)\mathrm{r}}\right)^{-1}G_{dd\sigma}^{(0)<}\left(G_{dd\sigma}^{(0)\mathrm{a}}\right)^{-1}=0 \tag{6.6.27}$$

最后, 式 (6.6.22) 中的量子点内的电子占有数 n_{σ} 需要自洽地解出, 这可运用自洽方程

$$n_{\sigma}=-\mathrm{i}\int\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}G_{dd\sigma}^{<}(\omega) \tag{6.6.28}$$

该方程是式 (4.3.25) 的直接推论. 这样我们的整个运算就能闭合了.

数值计算 (参见文献 Sun Q F, Wang J, Guo H. Phys. Rev., 2005, B71: 165310) 表明: 由于磁通和 Rashba SO 互作用的组合效应, 能在这个装置上产生一个大的自旋极化电导或电流, 并且自旋极化的方向和强度能由磁通和栅压来控制.

我们的简化模型仅假设了引线是非铁磁金属而且量子点是单能级的, 如果推广到铁磁金属引线以及多能级量子点情形 (参见上面所说文献), 则会发现 Rashba SO 互作用不仅能在引线和量子点之间的迁徙矩阵元中产生一个与自旋有关的相因子, 而且它还能产生出一个不同能级间的自旋翻转项 (但不能引起同能级上的自旋翻转).

附录 6A　式 (6.2.21) 的证明

利用电荷守恒定律:

$$\dot{\hat{\rho}}(\underline{q},t)+\mathrm{i}\underline{q}\cdot\hat{\underline{j}}(\underline{q},t)=0 \tag{6A.1}$$

并利用式 (6.2.18), 可得

$$\begin{aligned} \mathrm{i}q_a\langle\tilde{\hat{j}}_a(\underline{q})\hat{j}_b(-\underline{q})\rangle &= -\langle\dot{\hat{\rho}}(\underline{q},0)\hat{j}_b(-\underline{q},0)\rangle \\ &= \frac{\mathrm{i}}{\beta}\langle[\hat{\rho}(\underline{q}),\hat{j}_b(-\underline{q})]\rangle \end{aligned} \tag{6A.2}$$

再利用式 (6.1.7) 和式 (6.1.8), 公式 $[\hat{A},\hat{B}\hat{C}]_- = [\hat{A},\hat{B}]_+\hat{C} - \hat{B}[\hat{A},\hat{C}]_+$, 以及

$$\langle\hat{\rho}(\underline{q}=0)\rangle = -eVn \tag{6A.3}$$

$$\mathrm{i}q_a\langle\tilde{\hat{j}}_a(\underline{q})\hat{j}_b(-\underline{q})\rangle = \frac{\mathrm{i}}{\beta}\frac{(-e)^2}{m}q_bVn \tag{6A.4}$$

故式 (6.2.21) 成立.

附录 6B　自旋轨道相互作用的导出

6B.1　狄拉克方程

首先来建立自由电子的狄拉克方程, 利用爱因斯坦质能关系:

$$E^2 - \underline{p}^2 - m^2 = 0$$

此即

$$p^2 - m^2 = 0 \tag{6B.1.1}$$

其中, 4-动量 $p = (p^0 \equiv E, \underline{p})$. 我们将上式分解成如下形式:

$$p^2 - m^2 = (\gamma\cdot p + m)(\gamma\cdot p - m) = 0 \tag{6B.1.2}$$

上式意味着

$$(\gamma\cdot p)^2 = p^2$$

所以

$$\gamma^\mu p_\mu\gamma^\nu p_\nu = \frac{1}{2}(\gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu)p_\mu p_\nu = g^{\mu\nu}p_\mu p_\nu \tag{6B.1.3}$$

其中, 重复指标自动求和, $\mu,\nu = 0,1,2,3$.

故 γ^μ 满足关系式:

$$[\gamma^\mu,\gamma^\nu]_+ = 2g_{\mu\nu} \tag{6B.1.4}$$

我们给出 γ^μ 满足式 (6B.1.4) 的标准的矩阵表示:

$$\gamma^0 = \gamma_0 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \quad \gamma^i = -\gamma_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix} \tag{6B.1.5}$$

其中, I 是 2×2 的单位矩阵; $\sigma^i(i=1,2,3)$ 是泡利矩阵. 由式 (6B.1.2) 可建立如下方程:

$$(\gamma\cdot\hat{p}-m)\psi(x)=0 \tag{6B.1.6}$$

其中, 按建立薛定谔方程时所采用的量子化规则:

$$\hat{p}_\mu=\mathrm{i}\partial_\mu \tag{6B.1.7}$$

所以式 (6B.6) 也可以写成

$$(\mathrm{i}\gamma^\mu\partial_\mu-m)\psi(x)=0 \tag{6B.1.8}$$

式 (6B.1.6) 或式 (6B.1.8) 就是自由狄拉克方程. 如果令

$$\alpha\equiv\gamma^0\underline{\gamma}=\begin{pmatrix}0 & \underline{\sigma}\\ \underline{\sigma} & 0\end{pmatrix},\quad \beta\equiv\gamma^0 \tag{6B.1.9}$$

则自由狄拉克方程还可以写成另一种常见形式, 也是我们下面要采用的形式:

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi(x)=[\underline{\alpha}\cdot\underline{\hat{p}}+\beta m]\psi(x) \tag{6B.1.10}$$

6B.2 自旋轨道相互作用

当电子在电磁场 $(A_0,\underline{A})$ 中运动时, 其运动方程可在式 (6B.1.10) 中应用最小耦合法则来得到

$$\underline{\hat{p}}\to\underline{\hat{p}}-q\underline{A},\quad E\to E-qA_0 \tag{6B.2.1}$$

其中, q 是电子的电荷. 故电磁场中的狄拉克方程为

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi(x)=\hat{H}\psi(x) \tag{6B.2.2}$$

其中

$$\hat{H}=\underline{\alpha}\cdot(\hat{p}-q\underline{A})+\beta m+qA_0 \tag{6B.2.3}$$

现在只考虑外电场情形, 此时矢势 $\underline{A}=0$. 此外, 我们将研究的是电子的非相对论性运动, 即速度 $v\ll c$. 设 4 分量旋量 (狄拉克旋量)

$$\psi(x)=\psi(\underline{x},t)=\begin{pmatrix}\varphi(\underline{x})\\ \chi(\underline{x})\end{pmatrix}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et} \tag{6B.2.4}$$

其中, $\varphi(\underline{x})$ 和 $\chi(\underline{x})$ 是 2 分量旋量. 将上式代入式 (6B.2.2) 和式 (6B.2.3) 得

$$(E-qA_0-m)\varphi(\underline{x})=(\underline{\sigma}\cdot\underline{\hat{p}})\chi(\underline{x}) \tag{6B.2.5}$$

$$(E - qA_0 + m)\chi(\underline{x}) = (\underline{\sigma} \cdot \underline{\hat{p}})\varphi(\underline{x}) \tag{6B.2.6}$$

因为在非相对论中, 能量总是指总能量与静止能量之差, 故令

$$E' = E - m \tag{6B.2.7}$$

则有

$$(E' - qA_0)\varphi(\underline{x}) = (\underline{\sigma} \cdot \underline{\hat{p}})\chi(\underline{x}) \tag{6B.2.8}$$

$$(2m + E' - qA_0)\chi(\underline{x}) = (\underline{\sigma} \cdot \underline{\hat{p}})\varphi(\underline{x}) \tag{6B.2.9}$$

利用

$$\frac{1}{2m + E' - qA_0} \approx \frac{1}{2m}\left(1 - \frac{E' - qA_0}{2m}\right)$$

所以由式 (6B.2.9) 得

$$\chi(\underline{x}) = \left(1 - \frac{E' - qA_0}{2m}\right)\frac{\underline{\sigma} \cdot \underline{\hat{p}}}{2m}\varphi(\underline{x}) \tag{6B.2.10}$$

代入式 (6B.2.8) 得

$$(E' - qA_0)\varphi(\underline{x}) = \frac{\underline{\sigma} \cdot \underline{\hat{p}}}{2m}\left(1 - \frac{E' - qA_0}{2m}\right)\underline{\sigma} \cdot \underline{\hat{p}}\varphi(\underline{x})$$

即

$$E'\left(1 + \frac{\underline{p}^2}{4m^2}\right)\varphi(\underline{x}) = \left[\frac{\underline{p}^2}{2m} + qA_0 + \frac{q}{4m^2}(\underline{\sigma} \cdot \underline{\hat{p}})A_0(\underline{\sigma} \cdot \underline{\hat{p}})\right]\varphi(\underline{x}) \tag{6B.2.11}$$

由式 (6B.2.10) 可以看出, 当 $\underline{\hat{p}} \to 0$ 或 $\underline{\hat{v}}$ 很小时 (非相对论情形), $\chi \ll \varphi$, 故 4 分量狄拉克旋量就约化为 2 分量旋量理论.

用 $\left(1 - \dfrac{\underline{p}^2}{4m^2}\right)$ 左乘式 (6B.2.11) 得 (保留到 $\underline{v}^2$ 阶)

$$\hat{H}'\varphi(\underline{x}) = E'\varphi(\underline{x}) \tag{6B.2.12}$$

其中

$$\hat{H}' = \left(1 - \frac{\underline{p}^2}{4m^2}\right)\left(\frac{\underline{p}^2}{2m} + qA_0\right) + \frac{q}{4m^2}(\underline{\sigma} \cdot \underline{p})A_0(\underline{x})(\underline{\sigma} \cdot \underline{p}) \tag{6B.2.13}$$

必须注意的是, 此时 $\varphi(\underline{x})$ 不具有电子波函数的精确意义, 且算符 $\hat{H}'$ 也不能视为哈密顿. 因为第一, 积分 $\displaystyle\int \mathrm{d}^3x\varphi^*\varphi$ 并不是随时间不变的, 根据连续性方程, 只有积分

$\int \mathrm{d}^3x(\varphi^*\varphi + \chi^*\chi) = \int \mathrm{d}^3x\psi^*\psi$ 才不随时间变化, 因而函数 φ 不能归一化; 第二, $\hat{H}'$ 不是厄米算符, 因为它包含了非厄米项 $-\dfrac{\underline{p}^2}{4m^2}qA_0$. 现在引入波函数:

$$\phi \equiv \hat{g}\varphi \tag{6B.2.14}$$

选择 $\hat{g}$ 使 ϕ 可以归一化. 在一级近似下, 式 (6B.2.10) 给出

$$\chi \approx \frac{\underline{\sigma}\cdot\underline{p}}{2m}\varphi \tag{6B.2.15}$$

故

$$\int \mathrm{d}^3x(\varphi^*\varphi + \chi^*\chi) = \int \mathrm{d}^3x\varphi^*\left(1+\frac{\underline{p}^2}{4m^2}\right)\varphi = 1 \tag{6B.2.16}$$

非相对论性的薛定谔波函数 ϕ 的归一化则为

$$\int \mathrm{d}^3x\phi^*\phi = 1 \tag{6B.2.17}$$

对比式 (6B.2.17) 和式 (6B.2.16) 可知, $\hat{g}$ 可以选为

$$\hat{g} = \left(1+\frac{\underline{p}^2}{4m^2}\right)^{1/2} \approx 1+\frac{\underline{p}^2}{8m^2} \tag{6B.2.18}$$

将式 (6B.2.12) 两端左乘 $\hat{g}$, 得

$$\hat{g}\hat{H}'\hat{g}^{-1}\hat{g}\varphi = E'\hat{g}\varphi$$

这样有

$$\hat{H}\phi = E'\phi \tag{6B.2.19}$$

其中

$$\begin{aligned}\hat{H} = \hat{g}\hat{H}'\hat{g}^{-1} &= \left(1+\frac{\hat{\underline{p}}^2}{8m^2}\right)\hat{H}'\left(1-\frac{\hat{\underline{p}}^2}{8m^2}\right)\\ &\approx \hat{H}' + \frac{\hat{\underline{p}}^2}{8m^2}[\hat{\underline{p}}^2, \hat{H}']\end{aligned} \tag{6B.2.20}$$

利用公式

$$(\underline{\sigma}\cdot\underline{A})(\underline{\sigma}\cdot\underline{B}) = \underline{A}\cdot\underline{B} + \mathrm{i}\underline{\sigma}\cdot[\underline{A}\times\underline{B}]$$

和

$$[\underline{\sigma}\cdot\hat{\underline{p}}, f(\underline{x})] = \underline{\sigma}\cdot[\hat{p}, f(\underline{x})] = -\mathrm{i}\underline{\sigma}\cdot\boldsymbol{\nabla} f$$

可得公式

$$(\underline{\sigma}\cdot\underline{\hat{p}})A_0(\underline{x})(\underline{\sigma}\cdot\underline{\hat{p}}) = A_0\underline{\hat{p}}^2 - \mathrm{i}\left[(\boldsymbol{\nabla}A_0)\cdot\underline{\hat{p}} + \mathrm{i}\underline{\sigma}\cdot(\boldsymbol{\nabla}A_0\times\underline{\hat{p}})\right] \tag{6B.2.21}$$

再利用公式

$$[\underline{\hat{p}}^2, A_0(\underline{x})] = -\boldsymbol{\nabla}^2A_0 - 2\mathrm{i}(\boldsymbol{\nabla}A_0)\cdot\underline{\hat{p}} \tag{6B.2.22}$$

式 (6B.2.22) 的证明如下:

$$\begin{aligned}[\underline{\hat{p}}^2, A_0] &= \underline{\hat{p}}\cdot[\underline{\hat{p}}, A_0] + [\underline{\hat{p}}, A_0]\cdot\underline{\hat{p}} \\ &= \underline{\hat{p}}\cdot(-\mathrm{i})\boldsymbol{\nabla}A_0 + (-\mathrm{i})(\boldsymbol{\nabla}A_0)\cdot\underline{\hat{p}}\end{aligned} \tag{6B.2.23}$$

又因

$$\underline{\hat{p}}\cdot\boldsymbol{\nabla}A_0 - (\boldsymbol{\nabla}A_0)\cdot\underline{\hat{p}} = -\mathrm{i}\boldsymbol{\nabla}^2A_0 \tag{6B.2.24}$$

将上式代入式 (6B.2.23), 即可得到式 (6B.2.22).

将式 (6B.2.21) 和式 (6B.2.22) 应用于式 (6B.2.20) 得

$$\hat{H} = \frac{\underline{\hat{p}}^2}{2m} + qA_0 - \frac{\underline{\hat{p}}^4}{8m^3} + \frac{q}{8m^2}\boldsymbol{\nabla}^2A_0 + \frac{q}{4m^2}\underline{\sigma}\cdot[(\boldsymbol{\nabla}A_0)\times\underline{\hat{p}}] \tag{6B.2.25}$$

其中, 右边后三项是相对论修正项, 特别地, 最后一项就是自旋轨道耦合项. 由于电场强度为 $\underline{E} = -\boldsymbol{\nabla}A_0$, 且 $q = -e$, 所以

$$\hat{H}_{\mathrm{SO}} = -\frac{e}{4m^2}\underline{\sigma}\cdot(\underline{\hat{p}}\times\underline{E}) \tag{6B.2.26}$$

第七章　路径积分和超导

在前面我们采用了正则量子化途径 (算符途径). 另一种量子化途径就是所谓的路径积分途径, 和算符途径相比, 它有如下一些优点: 它是用经典量而不是算符来描述量子理论的. 它以很自然的方式把经典理论和量子理论联系起来, 特别是在一些算符途径遇到**因子次序困难**的问题中, 它能提供一条自然的通路. 路径积分法在规范场理论等中也被证明是一个有力的工具. 路径积分途径除了按相互作用直接展开的图形微扰方法外, 还提供了寻求一个非平庸的参考基态 ——“平均场” 的方法. 作为路径积分途径应用的例子, 我们讨论了超导电性及其 BCS 理论.

第一节　量子力学体系的路径积分

一、跃迁振幅的路径积分表述

作为有限自由度的无约束体系的跃迁振幅的路径积分表述的一个简单例子, 我们考虑非相对论的一维无自旋粒子, 其哈密顿为

$$\hat{H} = \hat{H}(\hat{p}, \hat{x}) \tag{7.1.1}$$

现在求粒子从 $t = t_a$ 时位置在 x_a 处的状态跃迁到 $t = t_b$ 时位置在 x_b 处的状态的**跃迁概率振幅**:

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) \tag{7.1.2}$$

由于薛定谔表象中的时间演化算符为 $u(t_b, t_a) = \exp[-\mathrm{i}(t_b - t_a)\hat{H}]$, 故知

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \langle x_b| \exp[-\mathrm{i}(t_b - t_a)\hat{H}]|x_a\rangle \tag{7.1.3}$$

以后, $K(x_b, t_b; x_a, t_a)$ 也常记为 $\langle x_b, t_b|x_a, t_a\rangle$ 或简记为 $K(b, a)$. 跃迁振幅的计算与 $\hat{H}(\hat{p}, \hat{x})$ 中的互不对易的算符 $\hat{p}$, $\hat{x}$ 的次序有关. 例如, 有相同经典表达式的量子力学算符 $\hat{H}_1(\hat{p}, \hat{x}) = \hat{p}^2\hat{x}^2$ 和 $\hat{H}_2(\hat{p}, \hat{x}) = \hat{x}^2\hat{p}^2$ 就是不同的算符. 这样, 当计算式 (7.1.3) 时, 必须确切地知道 $\hat{H}(\hat{p}, \hat{x})$ 中因子的次序.

定义 $\hat{p}, \hat{x}$ 的任何一个算符表达式 $\hat{B}(\hat{p}, \hat{x})$ 的 “**正规**” 形式为: $\hat{B}(\hat{p}, \hat{x})$:, 即在表达式中, 所有的 $\hat{p}$ 均在所有 $\hat{x}$ 的左边 (当然也可以定义为所有的 $\hat{p}$ 均在所有 $\hat{x}$ 的右边). 下面将讨论和正规形式的哈密顿

$$\hat{H}(\hat{p}, \hat{x}) =: \hat{H}(\hat{p}, \hat{x}) : \tag{7.1.4}$$

相应的跃迁振幅. 当哈密顿满足式 (7.1.4) 时, 有

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon\hat{H}(\hat{p},\hat{x})} =: \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon\hat{H}(\hat{p},\hat{x})} : -\varepsilon^2\hat{R} \tag{7.1.5}$$

其中

$$\hat{R} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-\mathrm{i}\varepsilon)^n}{(n+2)!}[\hat{H}(\hat{p},\hat{x})^{n+2} - :\hat{H}(\hat{p},\hat{x})^{n+2}:] \tag{7.1.6}$$

由于有因子次序问题, 我们无法直接精确计算有限时间间隔 $t_b - t_a$ 时的跃迁振幅式 (7.1.3), 但可作如下处理:

(1) 把有限时间间隔分成 n 个小段, $t_b - t_a = n\varepsilon$;

(2) 对每小段利用式 (7.1.5) 作近似计算 (舍去含 ε^2 的项);

(3) 把所有小段拼接起来, 得到有限时间间隔的结果, 拼接的方法是利用坐标 (或动量) 表象的基底矢量的完备性关系;

(4) 令 $n \to \infty$, 使每小段成为无穷小段, 从而误差趋于 $0(\varepsilon \to 0)$, 由此得到准确结果.

现在取 $t_b \equiv t_n > t_{n-1} > \cdots > t_1 > t_0 \equiv t_a$, 其中, $t_l = t_0 + \varepsilon l$, 则

$$\begin{aligned}K(b,a) =& \langle x_b|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon n\hat{H}(\hat{p},\hat{x})}|x_a\rangle \\ =& \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\cdots\mathrm{d}x_{n-1}\langle x_b|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon\hat{H}}|x_{n-1}\rangle\langle x_{n-1}|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon\hat{H}}|x_{n-2}\rangle\cdots \\ &- \langle x_2|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon\hat{H}}|x_1\rangle\langle x_1|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon\hat{H}}|x_a\rangle\end{aligned} \tag{7.1.7}$$

注意到

$$\begin{aligned}\langle x_l|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon\hat{H}(\hat{p},\hat{x})}|x_{l-1}\rangle \approx& \langle x_l|:\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon\hat{H}(\hat{p},\hat{x})}:|x_{l-1}\rangle \\ =& \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}p_l}{2\pi}\langle x_l|p_l\rangle\langle p_l|:\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon\hat{H}(\hat{p},\hat{x})}:|x_{l-1}\rangle\end{aligned} \tag{7.1.8}$$

将式 (7.1.8) 代入式 (7.1.7), 并取极限 $n \to \infty$, 得

$$K(b,a) = \lim_{n\to\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\prod_{l=1}^{n-1}\mathrm{d}x_l\prod_{l=1}^{n}\frac{\mathrm{d}p_l}{2\pi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varepsilon\sum\limits_{l=1}^{n}\left[p_l\frac{x_l-x_{l-1}}{\varepsilon}-H(p_l,x_{l-1})\right]} \tag{7.1.9}$$

这正是**跃迁振幅在相空间上的路径积分表示**. 上式可写成更为紧凑的但只是形式上的表达式:

$$K(b,a) = \int_a^b\mathfrak{D}x\mathfrak{D}p\mathrm{e}^{\mathrm{i}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t[p\dot{x}-H(p,x)]} = \int_a^b\mathfrak{D}x\mathfrak{D}p\mathrm{e}^{\mathrm{i}S[p,x]} \tag{7.1.10}$$

其中, 泛函积分测度由下式决定:

$$\int_a^b\mathfrak{D}x\mathfrak{D}p = \lim_{n\to\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\prod_{l=1}^{n-1}\mathrm{d}x_l\prod_{l=1}^{n}\frac{\mathrm{d}p_l}{2\pi} \tag{7.1.11}$$

而

$$S[p,x]=\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t[p(t)\dot{x}(t)-H(p(t),x(t))] \tag{7.1.12}$$

是对应相空间中路径 $(x(t),p(t))$ 的**经典正则作用量**. 该路径满足边界条件:

$$x(t_a)=x_a,\quad x(t_b)=x_b \tag{7.1.13}$$

由以上看出, 路径积分可理解成物理体系沿着有固定端点的所有可能路径演化的历史的和, 其中每种可能的历史有一个由作用量构成的相因子所给出的权重.

现在考虑一种常见的哈密顿:

$$\hat{H}(\hat{p},\hat{x})=\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(\hat{x}) \tag{7.1.14}$$

显然它就是一种正规形式, 因而我们可以运用前面的公式. 这样有

$$K(b,a)=\lim_{n\to\infty}\int\prod_{l=1}^{n-1}\mathrm{d}x_l\prod_{l=1}^{n}\frac{\mathrm{d}p_l}{2\pi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varepsilon\sum\limits_{l=1}^{n}\left[p_l\frac{x_l-x_{l-1}}{\varepsilon}-\frac{p_l^2}{2m}-V(x_{l-1})\right]} \tag{7.1.15}$$

利用高斯型积分公式

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}y\mathrm{e}^{-ay^2+by}=\sqrt{\frac{\pi}{a}}\mathrm{e}^{\frac{b^2}{4a}}\quad (a\neq 0,\mathrm{Re}a\geqslant 0) \tag{7.1.16}$$

对式 (7.1.15) 进行 p 的积分得

$$K(b,a)=\lim_{n\to\infty}\int\prod_{l=1}^{n-1}\mathrm{d}x_l\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\varepsilon}\right)^{\frac{n}{2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varepsilon\sum\limits_{l=1}^{n}\left[\frac{m}{2}\left(\frac{x_l-x_{l-1}}{\varepsilon}\right)^2-V(x_{l-1})\right]} \tag{7.1.17}$$

这正是**跃迁振幅在位形空间的路径积分表示**(即拉格朗日路径积分). 常写成如下的紧凑形式:

$$K(b,a)=\int_a^b\mathfrak{D}x\mathrm{e}^{\mathrm{i}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}tL(x(t))}=\int_a^b\mathfrak{D}x\mathrm{e}^{\mathrm{i}S[x(t)]} \tag{7.1.18}$$

其中, **作用量**

$$S[x(t)]=\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}tL(x(t))=\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t\left[\frac{1}{2}m\dot{x}^2-V(x)\right] \tag{7.1.19}$$

此时的积分测度 $\mathfrak{D}x(t)$ 定义为

$$\int_a^b\mathfrak{D}x=\lim_{n\to\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\prod_{l=1}^{n-1}\mathrm{d}x_l\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\varepsilon}\right)^{\frac{n}{2}}\equiv\int_{-\infty}^{\infty}[\mathrm{d}x]\nu \tag{7.1.20}$$

显然当 $\varepsilon \to 0$ 时, 积分测度 (7.1.20) 仍没有很好地定义. 特别是注意到只有相空间的路径积分表述 (7.1.9) 才是基本的, 而位形空间中的路径积分表述 (7.1.18) 仅是相空间路径积分的特定情形下的导出式, 测度 $\mathfrak{D}x(t)$ 的形式将随着 $L(x(t))$ 的不同而可能具有很大的差异. 虽然测度可能没有很好地定义, 但泛函积分有时可以借助于解析上可解的参考问题的解来归一化 (例如, 借助于 $V(x)=0$ 时的解).

在式 (7.1.8) 的推导中, 采用了近似: $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon\hat{H}}$:, 而不是通常采用的 $1-\mathrm{i}\varepsilon\hat{H}$ 近似, 是为了改善积分的收敛性, 后者在泰勒展开中, 单独的 p 的幂次的动量积分是发散的, 而前者对应的 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon p^2/(2m)}$ 却是有界的. 从式 (7.1.8) 还可以看出, 路径积分表述存在着一些任意性 (由于因子次序问题等), 因而在其他一些规定中, 我们可以把 $H(p_l,x_{l-1})$ 和 $V(x_{l-1})$ 中的 x_{l-1} 用 x_l 代替, 甚至 $V(x_{l-1})$ 还可以用 $\big[V(x_l)+V(x_{l-1})\big]/2$ 代替等. 当然物理可观测量是与这种任意性无关的.

现在考虑跃迁振幅 $K(b,a)$ 的经典极限, 即普朗克常量趋于零的情形. 为此, 恢复 $\hbar$, 则式 (7.1.10) 成为

$$K(b,a)=\int_a^b \mathfrak{D}x\mathfrak{D}p\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[p,x]} \tag{7.1.21}$$

显然在经典极限情形, $\hbar^{-1}S \gg 1$. 若一个路径不是经典运动方程 ($\delta S=0$) 的解, 则这个路径的一个微小的变化将导致 $\hbar^{-1}S$ 的一个巨大变化, 使得振幅急速振荡. 这样, 来自这些路径的贡献将消去, 故不必考虑这些路径. 相反, 由经典运动方程所确定的路径 (称为经典轨道), 使得作用量取极值, 因而对这些轨道的微小偏离并不怎么改变 S 的大小, 即只有与经典轨道邻近的路径对振幅的贡献才不相消. 因此在经典极限下, 对跃迁振幅的主要贡献来自经典路径的贡献. 这一点正是我们后面常采用的稳相近似法 (或半经典近似法) 的出发点, 即当量子效应不很大时, 我们只计及经典轨道及绕经典轨道的小的偏离 (又叫量子涨落) 的贡献.

另外, 在式 (7.1.9) 和式 (7.1.17) 中给出的一维运动的结果不难推广到三维空间情形, 只要用 $\underline{x}=(x^1,x^2,x^3)$ 代替 x, 并将因子 $\dfrac{m}{2\pi\mathrm{i}\varepsilon}$ 及 $\dfrac{\mathrm{d}p}{2\pi}$ 分别用 $\left(\dfrac{m}{2\pi\mathrm{i}\varepsilon}\right)^3$ 和 $\dfrac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}$ 代替, $\mathrm{d}x$ 用 d^3x 代替即可. 推广到其他有限自由度情形也是直接的.

二、几个基本计算实例, 稳相近似

只在极少数情形 (如自由粒子) 才能直接利用定义式 (7.1.9) 或式 (7.1.17) 来计算跃迁振幅. 在路径积分途径中, 通常采用近似方法, 例如, 下面讨论的**稳相近似法**(或叫**半经典近似**), 我们以一维谐振子为例说明其基本程序.

(1) 由变分原理

$$\delta S=\delta\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}tL(x(t),\dot{x}(t))=0 \tag{7.1.22}$$

(其边界条件为 $\delta x(t_b)=\delta x(t_a)=0$), 或者直接由经典拉氏运动方程来确定出经典路径

$$x(t)=x_{\rm cl}(t) \tag{7.1.23}$$

(2) 把所有路径 $x(t)$ 分成经典路径加上对经典路径的偏离 $\delta x(t)$, 即

$$x(t)=x_{\rm cl}(t)+\delta x(t) \tag{7.1.24}$$

(3) 将式 (7.1.24) 代入作用量中, 得

$$\begin{aligned}S[x(t)]&=S[x_{\rm cl}+\delta x(t)]=S[x_{\rm cl}]+\delta S+\frac{1}{2!}\delta^2 S+\cdots\\&=S[x_{\rm cl}]+\frac{1}{2!}\int_{t_a}^{t_b}{\rm d}t\int_{t_a}^{t_b}{\rm d}t'\left.\frac{\delta^2 S}{\delta x(t)\delta x(t')}\right|_{x(t)=x_{\rm cl}(t)}\delta x(t)\delta x(t')+\cdots\end{aligned} \tag{7.1.25}$$

其中, 已利用了式 (7.1.22). 在稳相近似中, 略去更高阶项.

(4) 将式 (7.1.25) 代入 $K(b,a)=\int_a^b \mathfrak{D}x(t){\rm e}^{{\rm i}S[x(t)]}$ 中得

$$K(b,a)=F(t_b,t_a){\rm e}^{{\rm i}S_{\rm cl}} \tag{7.1.26}$$

其中, $S_{\rm cl}\equiv S[x_{\rm cl}(t)]$ 是由经典轨道所确定的 (经典) 作用量, 而量子起伏因子 $F(t_b,t_a)$ 由式 (7.1.25) 中含 δx 的二次式确定. 由于边界条件, $F(t_b,t_a)$ 与 x_b,x_a 无关而只依赖于 t_b,t_a. 当体系具有时间平移不变性时, $F=F(t_b-t_a)$.

现在我们把上述基本程序应用到比较一般的一维运动问题:

$$L=\frac{m}{2}\dot{x}^2-V(x) \tag{7.1.27}$$

由于

$$\begin{aligned}\delta S&=\delta\int_{t_a}^{t_b}{\rm d}t\left[\frac{m}{2}\dot{x}^2-V(x)\right]=\int_{t_a}^{t_b}{\rm d}t[m\dot{x}\delta\dot{x}-V'(x)\delta x]\\&=-\int_{t_a}^{t_b}{\rm d}t[m\ddot{x}+V'(x)]\delta x\end{aligned} \tag{7.1.28}$$

其中, 利用了分部积分和边界条件. 故经典运动方程为

$$\delta S[x_{\rm cl}]=0$$

即

$$\ddot{x}_{\rm cl}+V'(x_{\rm cl})=0 \tag{7.1.29}$$

又由式 (7.1.28) 得

$$\delta^2 S = -\int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t\delta x \left[m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2} + V''(x) \right] \delta x \tag{7.1.30}$$

这样有

$$K(b,a) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}A_{\mathrm{cl}}} \int_a^b \mathfrak{D}x(t) \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t\delta x \left[m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2} + V''(x_{\mathrm{cl}}) \right] \delta x} \tag{7.1.31}$$

令

$$y(t) \equiv \delta x(t) = x(t) - x_{\mathrm{cl}}(t) \tag{7.1.32}$$

$$y(t_b) = y(t_a) = 0 \tag{7.1.33}$$

注意: $x(t)$ 与 $y(t)$ 之间的雅可比行列式为 1, 故

$$\mathfrak{D}x(t) = \mathfrak{D}y(t) \tag{7.1.34}$$

所以最后有

$$K(b,a) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}S_{\mathrm{cl}}} F(t_b - t_a)$$

其中

$$F(t_b - t_a) = \int_0^0 \mathfrak{D}y(t) \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}ty \left[m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2} + V''(x_{\mathrm{cl}}) \right] y} \tag{7.1.35}$$

对 y 的积分是一个高斯型泛函积分, 可以形式地求这个积分, 令算符 $B = m\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2} + V''(x_{\mathrm{cl}})$, 则积分的结果会出现算符 B 的行列式 (可理解成 B 的所有本征值的乘积):

$$F(t_b - t_a) = N[\det B]^{-1/2} \tag{7.1.36}$$

当然这只是形式上的表达式. 归一化因子 N 决定于测度 $\mathfrak{D}y(t)$ 的具体形式.

实例 1　现在把式 (7.1.35) 和式 (7.1.29) 应用于**谐振子**:

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \tag{7.1.37}$$

由运动方程和边界条件

$$\ddot{x}_{\mathrm{cl}} + \omega^2 x_{\mathrm{cl}} = 0 \tag{7.1.38}$$

$$x_{\mathrm{cl}}(t_a) = x_a, \quad x_{\mathrm{cl}}(t_b) = x_b \tag{7.1.39}$$

求出经典解为

$$x_{\mathrm{cl}} = \frac{x_b \sin\omega(t - t_a) + x_a \sin\omega(t_b - t)}{\sin\omega(t_b - t_a)} \tag{7.1.40}$$

(注意: 这个方程仅当 $t_b - t_a$ 不是 π/ω 的整数倍时才有意义, 以下总这样假设.)

由于

$$\begin{aligned} S_{\mathrm{cl}} &= \int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t \left(\frac{1}{2} m \dot{x}_{\mathrm{cl}}^2 - \frac{1}{2} m\omega^2 x_{\mathrm{cl}}^2 \right) \\ &= \int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t \frac{1}{2} m [x_{\mathrm{cl}}(-\ddot{x}_{\mathrm{cl}} - \omega^2 x_{\mathrm{cl}})] + \frac{1}{2} m x_{\mathrm{cl}} \dot{x}_{\mathrm{cl}} \Big|_{t_a}^{t_b} = \frac{1}{2} m x_{\mathrm{cl}} \dot{x}_{\mathrm{cl}} \Big|_{t_a}^{t_b} \\ &= \frac{m\omega}{2\sin\omega(t_b - t_a)} [(x_b^2 + x_a^2)\cos\omega(t_b - t_a) - 2x_b x_a] \end{aligned} \tag{7.1.41}$$

这样, 仅需要计算 $F(t_b - t_a)$, 我们用如下几种重要方法计算它.

方法 1: 运用已知参考解 (运用 $K(b,a)$ 的幺正条件) 来归一化.

为此计算从基态到基态的跃迁矩阵元

$$\begin{aligned} \langle 0|u(t_b - t_a)|0\rangle \equiv \langle 0, t_b|0, t_a\rangle &= \int \mathrm{d}x_a \mathrm{d}x_b \langle 0|x_b\rangle \langle x_b|u(t_b - t_a)|x_a\rangle \langle x_a|0\rangle \\ &= \int \mathrm{d}x_a \mathrm{d}x_b \langle 0|x_b\rangle K(b,a) \langle x_a|0\rangle \end{aligned} \tag{7.1.42}$$

可以从任何一本初等量子力学教科书中找到谐振子的基态波函数 $\langle x|0\rangle$. 不过我们这里宁可用一种所谓**大欧氏时间方法**来确定基态波函数.

注意到

$$\begin{aligned} K(b,a) &= \sum_n \langle x_b|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t_b}|E_n\rangle \langle E_n|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t_a}|x_a\rangle \\ &= \sum_n \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n(t_b - t_a)} \langle x_b|E_n\rangle \langle E_n|x_a\rangle \end{aligned} \tag{7.1.43}$$

这个式子是量子力学的**跃迁振幅的谱表示**.

现在定义欧氏时间 (虚时):

$$\tau = \mathrm{i}(t_b - t_a) \tag{7.1.44}$$

则式 (7.1.43) 成为

$$K(b,a) = \sum_n \mathrm{e}^{-E_n \tau} \langle x_b|E_n\rangle \langle E_n|x_a\rangle \tag{7.1.45}$$

故

$$\lim_{\tau\to\infty} K(b,a) \approx \mathrm{e}^{-E_0\tau} \langle x_b|0\rangle \langle 0|x_a\rangle \tag{7.1.46}$$

其中, E_0 为真空态 $|0\rangle$ 所对应的基态能量. 由式 (7.1.26) 和式 (7.1.41) 知

$$\begin{aligned} \lim_{\tau\to\infty} K(b,a) &= \lim_{\tau\to\infty} F(\tau) \exp\left\{ \mathrm{i} \frac{m\omega}{-2\mathrm{i}\mathrm{sh}(\omega\tau)} [(x_b^2 + x_a^2)\mathrm{ch}(\omega\tau)] \right\} \\ &= \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}m\omega x_b^2} F(\tau) \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}m\omega x_a^2} \end{aligned} \tag{7.1.47}$$

将式 (7.1.47) 与式 (7.1.46) 相比较, 可以认证经过适当归一化的基态波函数为

$$\langle x|0\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi}\right)^{1/4} \mathrm{e}^{-m\omega x^2/2} \tag{7.1.48}$$

现在把式 (7.1.48) 代入式 (7.1.42) 得

$$\begin{aligned}\langle 0,t_b|0,t_a\rangle &= \int \mathrm{d}x_a\mathrm{d}x_b \left(\frac{m\omega}{\pi}\right)^{1/2} \mathrm{e}^{-m\omega(x_b^2+x_a^2)/2}F(t_b-t_a)\mathrm{e}^{\mathrm{i}A_{\mathrm{cl}}(b,a)}\\ &= F(t_b-t_a)\left(\frac{m\omega}{\pi}\right)^{1/2}\frac{\pi}{\frac{m\omega}{2}\{[1-\mathrm{i}\cot\omega(t_b-t_a)]^2+[\sin\omega(t_b-t_a)]^{-2}\}^{1/2}}\\ &= F(t_b-t_a)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t_b-t_a)/2}\left[\frac{2\pi\mathrm{i}\sin\omega(t_b-t_a)}{m\omega}\right]^{1/2}\end{aligned} \tag{7.1.49}$$

将式 (7.1.49) 与如下已知参考解比较:

$$\langle 0,t_b|0,t_a\rangle = \exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{2}\omega(t_b-t_a)\right] \tag{7.1.50}$$

其中, 我们已指定经典基态能量为 $E_0=0$. 上式是显然的, 因为

$$H|0\rangle = \left(E_0+\frac{1}{2}\omega\right)|0\rangle = \frac{1}{2}\omega|0\rangle$$

从而 $\langle 0|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H(t_b-t_a)}|0\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\omega}{2}(t_b-t_a)}$, 此即式 (7.1.50). 这样, 我们得到

$$F(t_b-t_a) = \left[\frac{m\omega}{2\pi\mathrm{i}\sin\omega(t_b-t_a)}\right]^{1/2} \tag{7.1.51}$$

最后注意到, 对于谐振子, 其 $V(x)$ 只是 x 的二次式, 所以由式 (7.1.25) 知, $\delta^3 A=\delta^4 A=\cdots=0$, 即由稳相近似法得到的结果对于谐振子是一个精确的结果.

方法 2: 计算**算符行列式**.

由式 (7.1.35) 及式 (7.1.36) 知, 可直接去计算算符

$$B = m\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}+\omega^2\right) \equiv -m\tilde{B} \tag{7.1.52}$$

的行列式. 这需要将 $\tilde{B}$ 对角化, 即必须求解 $\tilde{B}$ 的本征值方程

$$-\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}+\omega^2\right)y_k(t) = \lambda_k y_k(t) \tag{7.1.53}$$

要求边界条件为

$$y_k(t_a) = y_k(t_b) = 0 \tag{7.1.54}$$

很容易得出满足正交归一条件

$$\int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t y_k(t) y_{k'}(t) = \delta_{kk'} \tag{7.1.55}$$

的本征函数为

$$y_k(t) = \sqrt{\frac{2}{T}} \sin \frac{\pi k}{T}(t - t_a) \quad (k > 0) \tag{7.1.56}$$

其中, $T = t_b - t_a$. 对应的本征值是

$$\lambda_k = \frac{\pi^2 k^2}{T^2} - \omega^2 \tag{7.1.57}$$

所以算符 $\tilde{B}$ 的行列式是本征值的积:

$$\det \tilde{B} = \prod_{k>0} \left(\frac{\pi^2 k^2}{T^2} - \omega^2 \right) \tag{7.1.58}$$

至于 $\det B$ 仅与 $\det \tilde{B}$ 相差一个与 ω 无关的因子, 它在最后的归一化处理中可以并入归一化常数中去. 式 (7.1.58) 也可通过傅里叶分量法来得到. 尽管式 (7.1.58) 是发散的 (它来自于与 ω 无关的无穷大的归一化因子), 但可将 $\det \tilde{B}$ 写成

$$\begin{aligned} \det \tilde{B} \equiv \det \left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2} - \omega^2 \right) &= \prod_{k>0} \frac{\pi^2 k^2}{T^2} \prod_{k>0} \left(1 - \frac{\omega^2 T^2}{\pi^2 k^2} \right) \\ &= \det \left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2} \right) \prod_{k>0} \left(1 - \frac{\omega^2 T^2}{\pi^2 k^2} \right) \end{aligned} \tag{7.1.59}$$

再次把与 ω 无关的因子并入到归一化常数中去. 由于

$$\prod_{k>0} \left(1 - \frac{\omega^2 T^2}{\pi^2 k^2} \right) = \frac{\sin \omega T}{\omega T} \tag{7.1.60}$$

所以由式 (7.1.36) 得

$$F(t_b - t_a) = N' \left(\frac{\sin \omega T}{\omega T} \right)^{-1/2} \tag{7.1.61}$$

既然 N' 与 ω 无关, 因而可以利用 $\omega = 0$ 时的自由粒子的结果来确定这个归一化常数. 由于自由粒子情形中的相应部分为 $\left(\frac{m}{2\pi \mathrm{i} T} \right)^{1/2}$, 所以可得

$$F(t_b - t_a) = \left(\frac{m\omega}{2\pi \mathrm{i} \sin \omega T} \right)^{1/2} \tag{7.1.62}$$

这与其他方法算出的结果一致.

实例 2 考虑外力存在时的**(受迫) 谐振子**, 其拉格朗日为

$$L=\frac{1}{2}m\dot{x}^2-\frac{1}{2}m\omega^2x^2+f(t)x \tag{7.1.63}$$

其跃迁振幅仍具有形式:

$$K(b,a)=F(t_b-t_a)\mathrm{e}^{\mathrm{i}S_{\mathrm{cl}}(b,a)} \tag{7.1.64}$$

其中, $F(t_b-t_a)$ 应与前面讨论过的谐振子情形相同, 这是因为外力项仅是 x 的一次项, 因而在含 $(\delta x)^2$ 的量子起伏中没有贡献. 所以我们仅需确定作用量 $S_{\mathrm{cl}}(b,a)$ 即可. 其经典运动方程为

$$m\ddot{x}_{\mathrm{cl}}+m\omega^2x_{\mathrm{cl}}=f(t) \tag{7.1.65}$$

初始条件为

$$x_{\mathrm{cl}}(t_a)=x_a,\quad x_{\mathrm{cl}}(t_b)=x_b \tag{7.1.66}$$

求解运动方程, 然后代入作用量中并进行积分可得

$$\begin{aligned}S_{\mathrm{cl}}(b,a)=&\frac{m\omega}{2\sin\omega(t_b-t_a)}\bigg[(x_a^2+x_b^2)\cos\omega(t_b-t_a)-2x_bx_a\\&+\frac{2x_b}{m\omega}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}tf(t)\sin\omega(t-t_a)+\frac{2x_a}{m\omega}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}tf(t)\sin\omega(t_b-t)\\&-\frac{2}{m^2\omega^2}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t_1\int_{t_a}^{t_1}\mathrm{d}t_2\sin\omega(t_b-t_1)\sin\omega(t_2-t_a)f(t_1)f(t_2)\bigg]\end{aligned} \tag{7.1.67}$$

为了说明场论中常用的路径积分方法, 我们再用如下的方法来处理受迫谐振子问题. 它的跃迁振幅为

$$K(b,a)=\int_a^b\mathfrak{D}x(t)\exp\left\{\mathrm{i}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t\left[\frac{1}{2}m\dot{x}^2-\frac{1}{2}m\omega^2x^2+f(t)x\right]\right\} \tag{7.1.68}$$

边界条件是 $x(t_a)=x_a, x(t_b)=x_b$.

这里先指出一个在前面没有重视的问题 (这在以后的研究中会变得突出起来), 这就是式 (7.1.68) 中的被积函数是纯振动的, 因而严格地说, 上面给出的跃迁振幅并不是真正定义得很好的. 为了保证积分收敛, 常采用如下两种方案: ① 引入虚时 $\tau=\mathrm{i}t$, 把跃迁振幅表达式解析延拓到欧氏空间, 这是后面要讨论的欧氏路径积分. ② 在积分表达式中引入收敛因子 (或称阻尼项):

$$\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\lambda\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}tx^2}\quad(\lambda>0) \tag{7.1.69}$$

在计算完成后, 令 $\lambda \to 0$ 即可. 引入收敛因子后, 式 (7.1.68) 中的被积表达式可写为

$$\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{2}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}tx\left[m\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}+\omega^2-\mathrm{i}\lambda\right)\right]x+\mathrm{i}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}tf(t)x\right\} \tag{7.1.70}$$

由泛函积分公式直接可得

$$K(b,a)=\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{2}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t\mathrm{d}t'f(t)B^{-1}(t,t')f(t')\right\}\times\int_a^b\mathfrak{D}x(t)\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{2}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}txBx\right) \tag{7.1.71}$$

其中

$$B=m\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}+\omega^2-\mathrm{i}\lambda\right) \tag{7.1.72}$$

而 $B^{-1}(t,t')$ 是 B 的逆, 满足

$$m\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}+\omega^2-\mathrm{i}\lambda\right)B^{-1}(t,t')=\delta(t-t') \tag{7.1.73}$$

即 $B^{-1}(t,t')$ 是一个格林函数. 通常定义

$$D(t,t')\equiv -B^{-1}(t,t') \tag{7.1.74}$$

则

$$\begin{aligned}K(b,a)&\equiv\langle x_b,t_b|x_a,t_a\rangle^f\\&=\langle x_b,t_b|x_a,t_a\rangle^{f=0}\exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{2}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t\mathrm{d}t'f(t)D(t,t')f(t')\right]\\&\equiv\langle x_b,t_b|x_a,t_a\rangle^{f=0}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}f_tD_{tt'}f_{t'}}\end{aligned} \tag{7.1.75}$$

其中, $f_tD_{tt'}f_{t'}$ 是上面的积分的简写 (采用了附录 7A.1 中的广义爱因斯坦规约). 我们用傅里叶变换法求 $D(t,t')$, 由于

$$m\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}+\omega^2-\mathrm{i}\lambda\right)D(t,t')=-\delta(t-t') \tag{7.1.76}$$

设

$$D(t,t')=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}E}{2\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E(t-t')}D(E) \tag{7.1.77}$$

连同 $\delta(t-t')$ 的积分表达式一起代入式 (7.1.76) 得

$$D(E)=\frac{1}{m(E^2-\omega^2+\mathrm{i}\lambda)} \tag{7.1.78}$$

将上式代入式 (7.1.77) 并应用残数定理, 得

$$D(t,t') = \frac{-\mathrm{i}}{2m\omega}\left[\theta(t-t')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t')} + \theta(t'-t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega(t-t')}\right] \tag{7.1.79}$$

现在考虑从基态到基态的跃迁振幅, 则有

$$\langle 0_{t_b}|0_{t_a}\rangle^f = \langle 0_{t_b}|0_{t_a}\rangle^{f=0}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}f_t D_{tt'} f_{t'}} \tag{7.1.80}$$

其中, $|0_{t_a}\rangle$ 表示 t_a 时刻的基态等. 进一步设 $t_a = -\infty$, $t_b = \infty$. (通常设在无穷远时刻, 无外力存在.) 则

$$\langle 0_\infty|0_{-\infty}\rangle^f = \langle 0_\infty|0_{-\infty}\rangle^{f=0}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}f_t D_{tt'} f_{t'}} \tag{7.1.81}$$

其中, $\langle 0_\infty|0_{-\infty}\rangle^{f=0}$ 表示在无外力时, 振子从无穷远的过去的基态跃迁到无穷远的未来的基态的跃迁振幅. 如果通过吸收零点能而把 $\langle 0_\infty|0_{-\infty}\rangle^{f=0}$ 归一化成 1, 则 $\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}f_t D_{tt'} f_{t'}}$ 就表示在外力存在时振子从无穷远过去的基态跃迁到无穷远未来的基态的跃迁振幅.

三、编时乘积

路径积分能自动地表示算符编时乘积的平均.

取任意两个算符函数 $\hat{A}(x,t_1)$ 和 $\hat{B}(x,t_2)$, 其中, x 为坐标算符. 不妨设 $t_1 \geqslant t_2$, 并且设分割 $[t_b, t_a]$ 的时间段中 t_m 最接近 t_1, t_n 最接近 t_2. 则有

$$\begin{aligned}
&\langle x_b|T\hat{A}(x,t_1)\hat{B}(x,t_2)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t\hat{H}(t)}|x_a\rangle \\
=&\langle x_b|T\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_{t_1}^{t_b}\mathrm{d}t\hat{H}(t)}\hat{A}(x,t_1)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_{t_2}^{t_1}\mathrm{d}t'\hat{H}(t')}\hat{B}(x,t_2)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_{t_a}^{t_2}\mathrm{d}t''\hat{H}(t'')}|x_a\rangle \\
=&\lim\int\prod_i^{N-1}\mathrm{d}x_i\langle x_b|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon\hat{H}}\cdots|x_m\rangle\langle x_m|\hat{A}(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon H}|x_{m-1}\rangle\langle x_{m-1}|\cdots\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon\hat{H}} \\
&\cdot|x_n\rangle\langle x_n|\hat{B}(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon H}|x_{n-1}\rangle\langle x_{n-1}|\cdots\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon\hat{H}}|x_a\rangle
\end{aligned}$$

上式最后一个等式的得出利用了 $\hat{A}(x,t) \equiv \mathrm{e}^{\mathrm{i}t\hat{H}}\hat{A}(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t\hat{H}}$ 中的指数因子在编时算符内可任意移动的事实. 仿照式 (7.1.1)$\sim$ 式 (7.1.10) 的步骤, 可知

$$\begin{aligned}
\langle x_b|T\hat{A}(x,t_1)\hat{B}(x,t_2)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t\hat{H}(t)}|x_a\rangle =& \int_a^b \mathfrak{D}x(t)\mathfrak{D}p(t)A(x(t_1))B(x(t_2)) \\
&\cdot\mathrm{e}^{\mathrm{i}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t[p(t)\dot{x}(t)-H(p(t),x(t))]}
\end{aligned} \tag{7.1.82}$$

若能进一步将 $p(t)$ 积分, 则可以化成

$$\langle x_b|T\hat{A}(x,t_1)\hat{B}(x,t_2)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t\hat{H}(t)}|x_a\rangle = \int_a^b \mathfrak{D}x(t)A(x(t_1))B(x(t_2))\mathrm{e}^{\mathrm{i}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}tL(x(t))} \tag{7.1.83}$$

依赖于动量的算符编时乘积的矩阵元也类似处理, 即可以通过插入在对应时刻的动量本征态的完全集来导出.

第二节　相干态路径积分

现在我们来考虑场论中的路径积分, 当体系的哈密顿是由产生和消灭算符的表达式给出时, 其路径积分形式可以直接利用相干态 (即消灭算符的本征态) 来得到, 而不必把哈密顿转换到以正则坐标和正则动量为变量的形式或转换成拉格朗日形式.

一、相干态

先考虑只有一个自由度的玻色子体系, 定义**相干态**$|a\rangle$ 为

$$|a\rangle \equiv \mathrm{e}^{a\hat{a}^{+}}|0\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{a^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle \tag{7.2.1}$$

其中, a 为复数 (要注意区分算符 $\hat{a}$ 和它的本征值 a); $|n\rangle$ 为归一化的粒子数算符的本征矢量. 利用上式易知 $|a\rangle$ 是消灭算符 $\hat{a}$ 的本征态:

$$\hat{a}|a\rangle = a|a\rangle \tag{7.2.2}$$

再利用 $\langle m|n\rangle = \delta_{mn}$, 可得出相干态之间的标积满足的关系式:

$$\langle a|a'\rangle = \mathrm{e}^{a^* a'} \tag{7.2.3}$$

显然真空态 $|0\rangle$ 是本征值为 0 的相干态, 并且由上式知

$$\langle 0|a\rangle = \mathrm{e}^0 = 1 \tag{7.2.4}$$

相干态在 Fock 空间中有如下封闭性关系:

$$\int \mathrm{d}\nu(a)\mathrm{e}^{-|a|^2}|a\rangle\langle a| = 1 \tag{7.2.5}$$

其中, 积分遍历整个复平面, 并且测度 $\mathrm{d}\nu(a)$ 为

$$\mathrm{d}\nu(a) = \frac{1}{\pi}\mathrm{d}\{\mathrm{Re}a\}\mathrm{d}\{\mathrm{Im}a\} = \frac{\mathrm{d}a\mathrm{d}a^*}{2\pi\mathrm{i}} \tag{7.2.6}$$

事实上, 借助于复 a 平面上的极坐标, 即令 $a = \rho\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}$, 并利用积分公式 $\int_0^{\infty}\mathrm{d}x\mathrm{e}^{-x}x^n = n!$ 易判断式 (7.2.5) 左端实际上就等于 $\sum_n |n\rangle\langle n|$, 从而式 (7.2.5) 成立. 式 (7.2.5) 说明相干态形成了完全集合, 但它是过完全的, 这可从相干态不是正交的事实看出.

由于相干态是完全的, 所以我们可以利用它们来作为 Fock 空间中的基底, 这种表象称为**相干态表象**. 下面我们给出状态在这种表象中的表示:

$$\text{右矢}\quad |\varphi\rangle \sim \langle a|\varphi\rangle \equiv \varphi(a^*) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^{*n}}{\sqrt{n!}}\langle n|\varphi\rangle \tag{7.2.7}$$

$$\text{左矢}\quad \langle\varphi| \sim \langle\varphi|a\rangle \equiv \varphi(a) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^{n}}{\sqrt{n!}}\langle \varphi|n\rangle \tag{7.2.8}$$

特别地有

$$|n\rangle \sim \langle a|n\rangle \equiv \frac{a^{*n}}{\sqrt{n!}} \tag{7.2.9}$$

$$\langle n| \sim \langle n|a\rangle \equiv \frac{a^{n}}{\sqrt{n!}} \tag{7.2.10}$$

态矢量的标积为

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \int \mathrm{d}\nu(a)\mathrm{e}^{-|a|^2}\langle\psi|a\rangle\langle a|\varphi\rangle = \int \mathrm{d}\nu(a)\mathrm{e}^{-|a|^2}\psi(a)\varphi(a^*) \tag{7.2.11}$$

由式 (7.2.11) 易知

$$\int \mathrm{d}\nu(a)\mathrm{e}^{-|a|^2}\frac{a^{*n}}{\sqrt{n!}}\frac{a^{m}}{\sqrt{m!}} = \langle m|n\rangle = \delta_{mn} \tag{7.2.12}$$

算符在这种表象中的表示易从如下关系中得出:

$$\hat{a}|a\rangle = a|a\rangle, \quad \langle a|\hat{a}^+ = a^*\langle a| \tag{7.2.13}$$

$$\hat{a}^+|a\rangle = \partial_a|a\rangle, \quad \langle a|\hat{a} = \partial_{a^*}\langle a| \tag{7.2.14}$$

式 (7.2.14) 可直接利用式 (7.2.1) 及 $\hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$ 来得到. 这样易知, 对于任何右矢, 有

$$\langle a|\hat{a}|\varphi\rangle = \partial_{a^*}\varphi(a^*) \tag{7.2.15}$$

$$\langle a|\hat{a}^+|\varphi\rangle = a^*\varphi(a^*) \tag{7.2.16}$$

这意味着在相干态表象中, 算符 $\hat{a}$ 和 $\hat{a}^+$ 的表示分别是 ∂_{a^*} 和 a^*. 由此也就知道 Fock 空间中的任何算符 $\hat{B}$ 的表示:

$$\langle\beta|\hat{B}(\hat{a}^+,\hat{a})|\varphi\rangle = B(a^*,\partial_{a^*})\varphi(a^*) \tag{7.2.17}$$

例如:

$$\langle a|\hat{a}^+\hat{a}\hat{a}\hat{a}^+\hat{a}|\varphi\rangle = a^*\langle a|\hat{a}\hat{a}\hat{a}^+\hat{a}|\varphi\rangle = a^*\partial_{a^*}\langle a|\hat{a}\hat{a}^+\hat{a}|\varphi\rangle$$

$$= \cdots = a^*\partial_{a^*}\partial_{a^*}a^*\partial_{a^*}\varphi(a^*)$$

算符的矩阵元 (或矩阵表示) 为

$$\langle a|\hat{a}|a'\rangle = a'\langle a|a'\rangle, \quad \langle a|\hat{a}^+|a'\rangle = a^*\langle a|a'\rangle$$

$$\langle a|\hat{B}(\hat{a}^+,\hat{a})|a'\rangle = B(a^*,\partial_{a^*})\langle a|a'\rangle \tag{7.2.18}$$

一对复变量 a^* 和 a 的任意普通函数可以表达成正规形式下的算符函数的矩阵元:

$$B(a^*,a') = \frac{\langle a|:\hat{B}(\hat{a}^+,\hat{a}):|a'\rangle}{\langle a|a'\rangle} \tag{7.2.19}$$

再考虑只有一个自由度的费米子体系.

由于 $(\hat{c}^+)^2 = 0$, 所以这个体系的 Fock 空间仅由两个态构成, 即 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle = \hat{c}^+|0\rangle$. 设相干态为 $|c\rangle$, 即 $\hat{c}|c\rangle = c|c\rangle$, 则有

$$\langle c|\hat{c}^+ = \langle c|c^* \tag{7.2.20}$$

由于 $\hat{c}^2 = \hat{c}^{+2} = 0$, 所以有

$$c^2 = c^{*2} = 0 \tag{7.2.21}$$

显然非零本征值 c 和 c^* 不可能是普通复数, 而是 Grassmann 代数中的元素 (参见附录 1A). 正因为这样, 我们可以将 c^* 视为另一个 Grassmann 数而与 c 无关. 由这个代数知

$$[c,c^*]_+ = 0 \tag{7.2.22}$$

相干态 $|c\rangle$ 可表示成

$$|c\rangle = \mathrm{e}^{-c\hat{c}^+}|0\rangle = |0\rangle - c\hat{c}^+|0\rangle = |0\rangle - c|1\rangle \tag{7.2.23}$$

注意到 $\hat{c}^+$ 的表示正是 c^*, 所以可以预见到 Grassmann 变量 c 和 c^* 与 $\hat{c}$ 和 $\hat{c}^+$ 应是反对易的. 我们以后总是这样假定的:

$$[\tilde{c},\hat{\tilde{c}}]_+ = 0, \quad (\tilde{c}\hat{\tilde{c}})^+ = \hat{\tilde{c}}^+\tilde{c}^* \tag{7.2.24}$$

其中, $\tilde{c}$ 代表 (c,c^*) 中的任一个; $\hat{\tilde{c}}$ 代表 $(\hat{c},\hat{c}^+)$ 中的任一个. 显然

$$\langle c| = \langle 0|\mathrm{e}^{-\hat{c}c^*} = \langle 0| - \langle 0|\hat{c}c^* \tag{7.2.25}$$

由式 (7.2.23)~ 式 (7.2.25) 知

$$\hat{c}^+|c\rangle = \overleftarrow{\partial}_c|c\rangle = -\vec{\partial}_c|c\rangle \tag{7.2.26}$$

$$\langle c|\hat{c} = \vec{\partial}_{c^*}\langle c| \tag{7.2.27}$$

我们只验证式 (7.2.26):

$$\overleftarrow{\partial}_c|c\rangle = \overleftarrow{\partial}_c\left(|0\rangle - c\hat{c}^+|0\rangle\right) = \hat{c}^+|0\rangle = \hat{c}^+\left(|0\rangle - c\hat{c}^+|0\rangle\right) = \hat{c}^+|c\rangle$$

易验证以上性质与

$$[\hat{c}, \hat{c}^+]_+ = 1 \tag{7.2.28}$$

是一致的. 事实上有

$$[\hat{c}, \hat{c}^+]_+|c\rangle = \left(-\hat{c}\vec{\partial}_c + \hat{c}^+c\right)|c\rangle = \left(\vec{\partial}_c c + c\vec{\partial}_c\right)|c\rangle = |c\rangle$$

这里利用了式 (1A.1.28) 的结果.

标积为

$$\langle c|c'\rangle = 1 + c^*c' = e^{c^*c'} \tag{7.2.29}$$

封闭性关系为

$$\int d\nu(c)e^{-c^*c}|c\rangle\langle c| = |0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1| = 1 \tag{7.2.30}$$

其中

$$d\nu(c) = dc^*dc \tag{7.2.31}$$

同样, Fock 空间中的态和算符可以在相干态表象中有相应的表示:

$$\langle c|\varphi\rangle \equiv \varphi(c^*) = \langle 0|\varphi\rangle + c^*\langle 0|\hat{c}|\varphi\rangle \tag{7.2.32}$$

$$\langle\psi|c\rangle \equiv \psi(c) = \langle\psi|0\rangle + c\langle\psi|\hat{c}^+|0\rangle \tag{7.2.33}$$

我们在这里给出式 (7.2.33) 的证明, 并由此说明 Grassmann 变量 c 不能随便与 Fock 空间中的矢量 $|\varphi\rangle$ 对易. 特别地, 有

$$c|n\rangle = \begin{cases} |n\rangle c & (n\text{为偶数时}) \\ -|n\rangle c & (n\text{为奇数时}) \end{cases} \tag{7.2.34}$$

证明

$$\begin{aligned}\langle\psi|c\rangle &= \langle\psi|0\rangle - \langle\psi|c\hat{c}^+|0\rangle = \langle\psi|0\rangle + \langle\psi|\hat{c}^+c|0\rangle \\ &= \langle\psi|0\rangle + \langle\psi|\hat{c}^+|0\rangle c\end{aligned}$$

因 $\langle\psi|\hat{c}^+|0\rangle$ 只是一个普通的数, 故上式的结果即式 (7.2.33).

态矢量的标积为

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \int d\nu(c)e^{-c^*c}\psi(c)\varphi(c^*) \tag{7.2.35}$$

算符的表示分别为

$$\langle c|\hat{c}|\varphi\rangle = \vec{\partial}_{c^*}\varphi(c^*) \tag{7.2.36}$$

$$\langle c|\hat{c}^+|\varphi\rangle = c^*\varphi(c^*) \tag{7.2.37}$$

$$\langle c|B(\hat{c}^+,\hat{c})|c'\rangle = B(c^*,\vec{\partial}_{c^*})\langle c|c'\rangle \tag{7.2.38}$$

同样, Grassmann 变量 c^*, c' 的任何一个函数可表达成

$$B(c^*,c') = \frac{\langle c|:B(\hat{c}^+,\hat{c}):|c'\rangle}{\langle c|c'\rangle} \tag{7.2.39}$$

最后我们将上述结果推广到多个自由度的体系, 并且用统一的记号, 使得结果对玻色子和费米子均适用.

令 $\varsigma = \pm 1$, 其中, 玻色子取 $+1$, 费米子取 -1. 我们将符号 $c, \hat{c}$ 等理解成分别有分量 $c_i, \hat{c}_i$ 的矢量, 并采用爱因斯坦求和规约. 对于玻色子, c_i 是复变量; 对于费米子, c_i 是 Grassmann 变量.

相干态 $|c\rangle$ 被定义为

$$|c\rangle \equiv \mathrm{e}^{\sum\limits_i \hat{c}_i^+ c_i}|0\rangle = \mathrm{e}^{\varsigma\sum\limits_i c_i\hat{c}_i^+}|0\rangle \tag{7.2.40}$$

从而

$$\langle c| = \langle 0|\mathrm{e}^{\varsigma\sum\limits_i \hat{c}_i c_i^*} \tag{7.2.41}$$

$$\hat{c}_i|c\rangle = c_i|c\rangle, \quad \langle c|\hat{c}_i^+ = \langle c|c_i^* \tag{7.2.42}$$

$$\hat{c}_i^+|c\rangle = \overleftarrow{\partial}_{c_i}|c\rangle = \varsigma\vec{\partial}_{c_i}|c\rangle \tag{7.2.43}$$

$$\langle c|\hat{c}_i = \vec{\partial}_{c_i^*}\langle c| \tag{7.2.44}$$

标积为

$$\langle c|c'\rangle = \mathrm{e}^{\sum\limits_i c_i^* c_i'} \tag{7.2.45}$$

封闭关系为

$$\int \mathrm{d}\nu(c)\mathrm{e}^{-\sum\limits_j c_j^* c_j}|c\rangle\langle c| = 1 \tag{7.2.46}$$

其中, 测度为

$$\mathrm{d}\nu(c) = \prod_i \mathrm{d}\nu(c_i) = \prod_i \frac{1}{\mathfrak{N}}(\mathrm{d}c_i^*\mathrm{d}c_i) \tag{7.2.47}$$

式中

$$\mathfrak{N} = \begin{cases} 2\pi\mathrm{i} & (\text{玻色子}) \\ 1 & (\text{费米子}) \end{cases} \tag{7.2.48}$$

在相干态表象中, 因态的表示记为

$$\langle c|\varphi\rangle \equiv \varphi(c^*) \tag{7.2.49}$$

故任一态矢量 $|\varphi\rangle$ 可展开成

$$|\varphi\rangle = \int \mathrm{d}\nu(c)\mathrm{e}^{-\sum\limits_j c_j^* c_j}\varphi(c^*)|c\rangle \tag{7.2.50}$$

算符的表示为

$$\langle c|\hat{c}_i|\varphi\rangle = \vec{\partial}_{c_i^*}\varphi(c^*) \tag{7.2.51}$$

$$\langle c|\hat{c}_i^+|\varphi\rangle = c_i^*\varphi(c^*) \tag{7.2.52}$$

$$\langle c|\hat{B}(\hat{c}_i^+,\hat{c}_i)|\varphi\rangle = B(c_i^*,\vec{\partial}_{c_i^*})\varphi(c^*) \tag{7.2.53}$$

$$\langle \varphi|\hat{B}(\hat{c}_i^+,\hat{c}_i)|c\rangle = B(\vec{\partial}_{c_i},c_i)\varphi(c) \tag{7.2.54}$$

其中, 两个 Grassmann 变量 θ_1, θ_2 的乘积的复共轭应理解成

$$(c_1c_2)^* = c_2^*c_1^* \tag{7.2.55}$$

同样还有

$$B(c^*,c') = \frac{\langle c| : B(\hat{c}^+,\hat{c}) : |c'\rangle}{\langle c|c'\rangle} \tag{7.2.56}$$

二、跃迁振幅的路径积分表述

与本章第一节中的方法相似, 我们计算初相干态 $|c_a\rangle$ 和终相干态 $|c_b\rangle$ 之间的跃迁振幅:

$$K(c_b^*,t_b;c_a,t_a) \equiv \langle c_b|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(t_b-t_a)\hat{H}}|c_a\rangle \tag{7.2.57}$$

将区间 $[t_b,t_a]$ 分成 n 段, 即取 $t_b\equiv t_n > t_{n-1} > \cdots > t_1 > t_0 \equiv t_a$, 其中, $t_l = t_a+\varepsilon l$.

在端点处的边界条件为

$$c(t=t_a) = c_a, \quad c(t=t_b) = c_b \tag{7.2.58}$$

我们仍设哈密顿 $H(\hat{c}^+,\hat{c})$ 是有正规次序的算符. 这样

$$\mathrm{e}^{\varepsilon\hat{H}(\hat{c}^+,\hat{c})} =: \mathrm{e}^{\varepsilon\hat{H}(\hat{c}^+,\hat{c})} : +0(\varepsilon^2) \tag{7.2.59}$$

显然

$$\langle c_l| : \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon\hat{H}} : |c_{l-1}\rangle = \langle c_l|c_{l-1}\rangle\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon H(c_l^*,c_{l-1})}| \tag{7.2.60}$$

再利用封闭性关系 (7.2.46), 则式 (7.2.57) 成为

$$
\begin{aligned}
K(c_b^*,t_b;c_a,t_a) &= \lim_{n\to\infty}\int\prod_{l=1}^{n-1}\mathrm{d}\nu(c_l)\mathrm{e}^{-c_l^*c_l} \\
&\quad\cdot\langle c_b|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon\hat{H}}|c_{n-1}\rangle\langle c_{n-1}|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon\hat{H}}|c_{n-2}\rangle\cdots\langle c_1|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon\hat{H}}|c_a\rangle \\
&= \lim_{n\to\infty}\int\prod_{l=1}^{n-1}[d\nu(c_l)\mathrm{e}^{-c_l^*c_l}\langle c_l|c_{l-1}\rangle]\langle c_n|c_{n-1}\rangle\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon\sum\limits_{l=1}^{n}H(c_l^*,c_{l-1})} \\
&= \lim_{n\to\infty}\int\prod_{l=1}^{n-1}\frac{\mathrm{d}c_l^*\mathrm{d}c_l}{\mathfrak{N}}\mathrm{e}^{c_n^*c_{n-1}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varepsilon\sum\limits_{l=1}^{n-1}\left[i\frac{c_l^*(c_l-c_{l-1})}{\varepsilon}-H(c_l^*,c_{l-1})\right]}
\end{aligned}
\tag{7.2.61}
$$

在上述的表达式中, $c_l(l=0,1,\cdots,n)$ 均应视为有分量 $(c_l)_i$ 的矢量符号, 这样没有明显写出的对 i 的指标运算是不言而喻的. 例如, $\mathrm{d}c_l^*\mathrm{d}c_l=\prod\limits_i\mathrm{d}(c_l^*)_i\mathrm{d}(c_l)_i$, $c_n^*c_n=\sum\limits_i(c_n^*)_i(c_n)_i$ 等. 在 $n\to\infty$ 极限情形, 有

$$
c_l^*\frac{c_l-c_{l-1}}{\varepsilon}=c^*(t)\frac{\partial}{\partial t}c(t) \tag{7.2.62}
$$

$$
H(c_l^*,c_{l-1})=H(c^*(t),c(t)) \tag{7.2.63}
$$

所以有如下结果:

$$
K(c_b^*,t_b;c_a,t_a)=\int_{c_a}^{c_b^*}\mathfrak{D}[c^*(t)c(t)]\mathrm{e}^{\mathrm{i}S[c^*(t),c(t)]} \tag{7.2.64}
$$

其中, 测度为

$$
\mathfrak{D}[c^*(t)c(t)]\equiv\lim_{n\to\infty}\int\prod_{l=1}^{n-1}\frac{\mathrm{d}c_l^*\mathrm{d}c_l}{\mathfrak{N}}=\lim_{n\to\infty}\int\prod_{l=1}^{n-1}\prod_i\frac{(\mathrm{d}c_l^*)_i(\mathrm{d}c_l)_i}{\mathfrak{N}} \tag{7.2.65}
$$

有效作用量 $S[c^*(t),c(t)]$ 为

$$
S[c^*(t),c(t)]=-\mathrm{i}c_b^*c_b+\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t\left[c^*(t)\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}c(t)-H(c^*(t),c(t))\right] \tag{7.2.66}
$$

它也可用分量形式写出. 式 (7.2.61) 右端指数中 $c_n^*c_{n-1}$ 是边界项, 如果将式 (7.2.62) 改为 $(-c_{l+1}^*+c_l^*)c_l/\varepsilon\equiv\left[-\frac{\partial}{\partial t}c^*(t)\right]c(t)$, 则边界项会成为 $c_1^*c_0$. 也可采用对称的表达式, 它们都是等价的.

作为一个简单例子, 考虑 $H=\omega\hat{c}^+\hat{c}$ 的一个自由度的玻色子或费米子体系.

$$
K(c_b^*,t_b;c_a,t_a)=\lim_{n\to\infty}\int\prod_{l=1}^{n-1}\frac{\mathrm{d}c_l^*\mathrm{d}c_l}{\mathfrak{N}}\mathrm{e}^{c_n^*c_{n-1}}\mathrm{e}^{-\sum\limits_l[c_l^*(c_l-c_{l-1})-\mathrm{i}\varepsilon\omega c_l^*c_{l-1}]}
$$

$$= \lim_{n\to\infty} \int \prod_{l=1}^{n-1} \frac{\mathrm{d}c_l^* \mathrm{d}c_l}{\mathfrak{N}} \mathrm{e}^{-(C^*)^{\mathrm{T}} \varLambda C + (uv)\begin{pmatrix} C \\ C^* \end{pmatrix}} \tag{7.2.67}$$

其中, C 是分量为 $c_1, c_2, \cdots, c_{n-1}$ 的列矩阵; $(C^*)^{\mathrm{T}}$ 是对应的共轭行矩阵; $\varLambda$ 是 $(n-1)\times(n-1)$ 的方阵:

$$\varLambda = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots \\ -(1-\mathrm{i}\varepsilon\omega) & 1 & 0 & \cdots \\ 0 & -(1-\mathrm{i}\varepsilon\omega) & 1 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \end{bmatrix} \tag{7.2.68}$$

$$u = (\underbrace{0, \cdots, 0}_{n-2\text{个}}, c_b^*), \quad v = (\zeta c_a, \underbrace{0, \cdots, 0}_{n-2\text{个}}) \tag{7.2.69}$$

式中, $\zeta = \pm 1$ 分别对应于玻色子和费米子情形. 利用高斯积分公式, 式 (7.2.67) 成为

$$K(c_b^*, t_b; c_a, t_a) = \lim_{n\to\infty} (\det \varLambda)^{-\varsigma} \mathrm{e}^{\varsigma u \varLambda^{-1} v} \tag{7.2.70}$$

由于 $\det \varLambda = 1$, 而且

$$\begin{aligned} \varsigma u \varLambda^{-1} v &= \varsigma c_b^* (\varLambda^{-1})_{n-1,1} \varsigma c_a \\ &= (-1)^n c_b^* [-(1-\mathrm{i}\varepsilon\omega)]^{n-2} c_a = c_b^* (1-\mathrm{i}\varepsilon\omega)^{n-2} c_a \end{aligned} \tag{7.2.71}$$

由于当 $n \to \infty$ 时, 有

$$(1-\mathrm{i}\varepsilon\omega)^{n-2} \approx (1-\mathrm{i}\varepsilon\omega)^n \approx (\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega\varepsilon})^n$$

所以

$$K(c_b^*, t_b; c_a, t_a) = \exp\{c_b^* \exp[-\mathrm{i}\omega(t_b - t_a)] c_a\} \tag{7.2.72}$$

注意的是, 与前面所谈的费曼路径积分相比较, 相干态路径积分有一个显著的区别. 这就是当我们在路径积分表达式中恢复 $\hbar$ 因子后, 可以看出, 前面所谈的费曼路径积分中的指数上只有一个整体因子 $\hbar$, 而在相干态路径积分中的指数中还将出现一个相对因子 $\hbar$, 它与 $\mathrm{i}\dfrac{\partial}{\partial t}$ 一起构成了量子力学中的算符 $\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}$. 这使得在相干态路径积分情形使用前面的稳相近似法后, 将产生完全不同于经典极限的结果.

三、演化算符的迹

演化算符的迹 $\mathrm{tr}u(t_b, t_a)$ 也可用路径积分表述. 这里任何一个算符 $\hat{B}$ 的迹可借助于 Fock 空间中的一组基 $\{|n\rangle\}$ 而定义为

$$\mathrm{tr}\hat{B} = \sum_n \langle n|\hat{B}|n\rangle \tag{7.2.73}$$

可以证明

$$\mathrm{tr}\hat{B} = \int \mathrm{d}\nu(c)\mathrm{e}^{-c^*c}\langle c|\hat{B}|\varsigma c\rangle \tag{7.2.74}$$

其中, 当 c 为复数时, $\varsigma = 1$; 当 c 为 Grassmann 数时, $\varsigma = -1$.

证明　c 为复数时, 式 (7.2.74) 是显然的. 我们仅考虑 c 为 Grassmann 数的情形, 此时有

$$\langle n|c\rangle = c^n \quad (n = 0, 1) \tag{7.2.75}$$

且由式 (7.2.46) 知

$$\int \mathrm{d}\nu(c)\mathrm{e}^{-c^*c}\langle n|c\rangle\langle c|m\rangle = \int \mathrm{d}\nu(c)\mathrm{e}^{-c^*c}c^n(c^*)^m = \delta_{nm}$$

对于任意算符 $\hat{B}$, 它可以在占有数表象中表达成

$$\hat{B} = \sum_{m,n=0,1} |m\rangle B_{mn}\langle n|$$

故有

$$\begin{aligned}
\int \mathrm{d}\nu(c)\mathrm{e}^{-c^*c}\langle c|\hat{B}|-c\rangle &= \int \mathrm{d}\nu(c)\mathrm{e}^{-c^*c}\sum_{m,n}\langle c|m\rangle B_{mn}\langle n|-c\rangle \\
&= \sum_{m,n} B_{mn}\int \mathrm{d}\nu(c)\mathrm{e}^{-c^*c}(c^*)^m(-c)^n \\
&= \sum_{m,n} B_{mn}\int \mathrm{d}\nu(c)\mathrm{e}^{-c^*c}c^n(c^*)^m \\
&= \sum_m B_{mm} = \mathrm{tr}\hat{B}
\end{aligned}$$

由于改变积分变量 $c_i \to \varsigma c_i$, $c_i^* \to \varsigma c_i^*$, 式 (7.2.75) 的值不会改变, 所以我们也有

$$\mathrm{tr}\hat{B} = \int \mathrm{d}\nu(c)\mathrm{e}^{-c^*c}\langle \varsigma c|\hat{B}|c\rangle \tag{7.2.76}$$

显然

$$\mathrm{tr}\hat{I} = \int \mathrm{d}\nu(c)\mathrm{e}^{-c^*c}\langle \varsigma c|c\rangle$$

其中, $\hat{I}$ 是单位算符. 在 N 个生成元的 Grassmann 变量情形, 有

$$\mathrm{tr}\hat{I} = 2^N \tag{7.2.77}$$

这正是 Grassmann 代数所形成的矢量空间的维数. 由式 (7.2.57) 及式 (7.2.75), 可以将演化算符的迹写成如下形式:

$$\mathrm{tr}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(t_a-t_b)\hat{H}} = \int \mathrm{d}\nu(c)\mathrm{e}^{-c^*c}\langle c|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(t_b-t_a)\hat{H}}|\varsigma c\rangle = \int \mathrm{d}\nu(c)\mathrm{e}^{-c^*c}K(c^*,t_b;\varsigma c,t_a) \tag{7.2.78}$$

代入式 (7.2.61) 和式 (7.2.64), 可分别得到路径积分表述的分立形式

$$\begin{aligned}\mathrm{tr}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(t_a-t_b)\hat{H}} = &\lim_{n\to\infty}\int\prod_{l=1}^{n}\mathrm{d}\nu(c_l)\mathrm{e}^{-c^*c}\\ &\cdot\exp\left\{\sum_{l=1}^{n}[c_l^*c_{l-1}-\mathrm{i}\varepsilon H(c_l^*,c_{l-1})]\right\}\end{aligned} \tag{7.2.79}$$

和连续形式

$$\mathrm{tr}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(t_a-t_b)\hat{H}} = \int \mathfrak{D}[c^*(t)c(t)]\mathrm{e}^{\mathrm{i}S[c^*,c]} \tag{7.2.80}$$

其中

$$S[c^*,c] = \int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t\left[c^*(t)\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}c(t) - H(c^*(t),c(t))\right] \tag{7.2.81}$$

$$\int\mathfrak{D}[c^*(t)c(t)] \equiv \lim_{n\to\infty}\int\prod_{l=1}^{n}\frac{\mathrm{d}c_l^*\mathrm{d}c_l}{\mathfrak{N}} \tag{7.2.82}$$

以上两种形式的路径积分中, 路径均满足如下边界条件:

$$|c(t_a)\rangle = |\varsigma c(t_b)\rangle \tag{7.2.83}$$

对于 $\varsigma=1$ 的情形, 称为**周期性边界条件**, 而对于 $\varsigma=-1$ 的 Grassmann 量的情形, 则称为**反周期边界条件**.

第三节 欧氏路径积分, 配分函数与格林函数

一、欧氏路径积分表示

在前面几节的路径积分的讨论中, 我们采用了 “实时” 的表述形式, 即 t 是实的物理时间. 但有时采用 “虚时” 的表述形式是方便的. 这种情形下的路径积分称为**欧氏路径积分**.

我们在前面已指出, 在实时情形, 泛函积分常出现发散, 这使得跃迁振幅的路径积分表示并不是真正定义好了的. 为了使路径积分有确切的定义, 除了引入衰减的收敛因子的方法外, 还可采用引入虚时而过渡到欧氏形式的方法. 由式 (7.1.46) 可以看出, 欧氏形式的路径积分很适宜于研究体系的基态结构. 此外, 它还能比较清楚地揭示出量子场论和统计力学之间的深刻联系. 在路径积分的半经典近似中, 它能给势垒贯穿效应提供一种自然的解释.

下面我们将看到, 时间演化算符在欧氏形式下能导致量子统计中的密度矩阵和配分函数. 作变换 (Wick 旋转):

$$t \to \tau = \mathrm{i}t \tag{7.3.1}$$

则

$$u(t_b, t_a) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(t_b - t_a)\hat{H}} \to u(\tau_b, \tau_a) = \mathrm{e}^{-(\tau_b - \tau_a)\hat{H}} \tag{7.3.2}$$

它相应的矩阵元为

$$K_{\mathrm{E}}(\underline{x}_b, \tau_b; \underline{x}_a, \tau_a) \equiv \langle \underline{x}_b | u(\tau_b, \tau_a) | \underline{x}_a \rangle = \langle \underline{x}_b | \mathrm{e}^{-(\tau_b - \tau_a)\hat{H}} | \underline{x}_a \rangle \tag{7.3.3}$$

完全可以仿照本章第一节的方法得到上式的欧氏路径积分表示, 但我们不再重复这一方法, 而改用另一种常用的 “**解析延拓**” 的方法. 为了对比起见, 仍考虑一维情形, 在式 (7.3.1) 的变换下, 对式 (7.1.10) 进行解析延拓, 可得**相空间上的欧氏路径积分表示**:

$$K_{\mathrm{E}}(\underline{x}_b, \tau_b; \underline{x}_a, \tau_a) = \int_a^b \mathfrak{D}' x \mathfrak{D} p \mathrm{e}^{-S_{\mathrm{E}}[p,x]} \tag{7.3.4}$$

其中, $\mathfrak{D}'x$ 是为了和下面的式 (7.3.8) 中的 $\mathfrak{D}x$ 相区别, 上式的积分测度仍有式 (7.1.11) 的形式, 但也可以写成如下对称的形式:

$$\int_a^b \mathfrak{D}' x \mathfrak{D} p = \lim_{x \to \infty} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{l=1}^{n} \frac{\mathrm{d}x_l \mathrm{d}p_l}{2\pi} \delta(x_n - x_b) \tag{7.3.5}$$

$S_{\mathrm{E}}[p, x]$ 为体系的欧氏作用量:

$$S_{\mathrm{E}}[p, x] = \int_{\tau_a}^{\tau_b} \mathrm{d}\tau \left[-\mathrm{i}p(\tau) \frac{\mathrm{d}x(\tau)}{\mathrm{d}\tau} + H(p, x) \right] \tag{7.3.6}$$

对于由式 (7.1.14) 中的哈密顿所描述的体系, 可进一步得出式 (7.3.3) 在**位形空间上的欧氏路径积分表示**:

$$K_{\mathrm{E}}(\underline{x}_b, \tau_b; \underline{x}_a, \tau_a) = \int_a^b \mathfrak{D} x \mathrm{e}^{-S_{\mathrm{E}}[x(\tau)]} \tag{7.3.7}$$

积分测度定义为

$$\int_a^b \mathfrak{D} x(\tau) \equiv \lim_{n \to \infty} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{l=1}^{n-1} \mathrm{d}x_l \left(\frac{m}{2\pi\varepsilon} \right)^{n/2} \tag{7.3.8}$$

其中

$$\varepsilon = (\tau_b - \tau_a)/n \tag{7.3.9}$$

欧氏作用量 $S_{\mathrm{E}}[x(\tau)]$ 为

$$S_{\mathrm{E}}[x(\tau)] = \int_{\tau_a}^{\tau_b} \mathrm{d}\tau \left[\frac{1}{2}m\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}\tau}\right)^2 + V(x(\tau))\right] = \int_{\tau_a}^{\tau_b} \mathrm{d}\tau H(x(\tau)) \tag{7.3.10}$$

这表明对于我们现在所讨论的量子力学体系, “实时” 情形下的拉格朗日变成了虚时情形下的哈密顿. 以上的公式很易直接推广到三维情形及更多自由度情形.

二、密度矩阵与配分函数的路径积分表述

我们知道, 对于**正则系综**, (未归一化的)**密度算符**为

$$\hat{\rho} \equiv \mathrm{e}^{-\beta \hat{H}} \tag{7.3.11}$$

它在坐标表象中的矩阵表示 (即密度矩阵) 可以表达为 “虚时” 跃迁振幅. 对于单粒子体系, 有

$$\rho(\underline{x}, \underline{x}'; \beta) \equiv \langle \underline{x}|\hat{\rho}|\underline{x}'\rangle = K_{\mathrm{E}}(\underline{x}, \beta; \underline{x}', 0) \tag{7.3.12}$$

其中, 我们已在式 (7.3.3) 中取 $\underline{x}_a = \underline{x}', \tau_a = 0, \underline{x}_b = \underline{x}, \tau_b = \beta$. 这样, 密度矩阵可借助式 (7.3.4) 及式 (7.3.7)(或它们的三维推广) 而表达成欧氏路径积分的形式, 这里不再写出.

坐标表象中的**配分函数** $\boldsymbol{Z}$ 可以写成

$$Z \equiv \mathrm{tr}\hat{\rho} = \int \mathrm{d}^3x \langle \underline{x}|\hat{\rho}|\underline{x}\rangle = \int \mathrm{d}^3x K_{\mathrm{E}}(\underline{x}, \beta; \underline{x}, 0) \tag{7.3.13}$$

例如, 考虑哈密顿为

$$\hat{H} = \frac{\hat{\underline{p}}^2}{2m} + V(\underline{x}) \tag{7.3.14}$$

的单粒子体系, 则

$$\begin{aligned} Z &= \int \mathrm{d}^3x \int_{\underline{x}(0)=\underline{x}}^{\underline{x}(\beta)=\underline{x}} \mathfrak{D}^3x \mathrm{e}^{-\int_0^\beta \mathrm{d}\tau \left[\frac{m}{2}\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}\tau}\right)^2 + V(\underline{x}(\tau))\right]} \\ &\equiv \int_{\underline{x}(\beta)=\underline{x}(0)} \mathfrak{D}^3x \mathrm{e}^{-\int_0^\beta \mathrm{d}\tau \left[\frac{m}{2}\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}\tau}\right)^2 + V(\underline{x}(\tau))\right]} \end{aligned} \tag{7.3.15}$$

其中, 第二式的简略写法表达了这样一个事实: 在间隔的端点处对 $\underline{x}$ 点 (即分点 $\underline{x}_0 = \underline{x}_n$) 的积分没有实质上的不同. 这样配分函数实际上是对具有周期 β 的所有周期轨道的和而言的.

对于有 N 个粒子的全同粒子体系, 其配分函数可借助于对态的对称化或反称化的要求而写成

$$Z=\frac{1}{N!}\sum_P \varsigma^P\int\prod_{i=1}^N \mathrm{d}^3x\langle \underline{x}_{P1}\underline{x}_{P2}\cdots\underline{x}_{PN}|\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}}|\underline{x}_1\underline{x}_2\cdots\underline{x}_N\rangle \tag{7.3.16}$$

其中, $|\underline{x}_1\underline{x}_2\cdots\underline{x}_N\rangle\equiv|\underline{x}_1\rangle|\underline{x}_2\rangle\cdots|\underline{x}_N\rangle$; ς^P 是置换 P 的宇称. ς 对玻色子和费米子分别等于 $+1$ 及 -1. 显然当哈密顿为

$$H=\sum_{i=1}^N\frac{\hat{\underline{p}}_i^2}{2m}+\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}V(\underline{x}_i-\underline{x}_j) \tag{7.3.17}$$

时, 配分函数为

$$Z=\frac{1}{N!}\sum_P\varsigma^P\int\limits_{\substack{\underline{x}_1(\beta)=\underline{x}_{P1}(0)\\ \vdots\\ \underline{x}_N(\beta)=\underline{x}_{PN}(0)}}\mathfrak{D}^3x_1\cdots\mathfrak{D}^3x_N\mathrm{e}^{-\int_0^\beta\mathrm{d}\tau\left[\sum\limits_{i=1}^N\frac{m}{2}\left(\frac{\mathrm{d}\underline{x}_i}{\mathrm{d}\tau}\right)^2+\frac{1}{2}\sum\limits_{i\neq j}V(\underline{x}_i-\underline{x}_j)\right]} \tag{7.3.18}$$

显然上述全同粒子体系的路径积分方法过于复杂而难于处理, 幸好有如下更为简洁有效的路径积分方法, 即对于表达成二次量子化形式的一般多粒子体系的哈密顿, 可借助于相干态表象来表述配分函数. 对于**巨正则系综**, 密度算符为

$$\hat{\rho}\equiv\mathrm{e}^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})} \tag{7.3.19}$$

其中, μ 是化学势; $\hat{N}$ 是粒子数算符. **巨配分函数**为

$$Z=\mathrm{tr}\mathrm{e}^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}/Z \tag{7.3.20}$$

相干态表象下的巨配分函数为

$$Z=\int\mathrm{d}\nu(c)\langle c|\mathrm{e}^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}|\varsigma c\rangle \tag{7.3.21}$$

利用式 (7.2.80) 的适当的变换, 得

$$Z=\int\limits_{c(\beta)=\varsigma c(0)}\mathfrak{D}[c^*(\tau)c(\tau)]\mathrm{e}^{-\int_0^\beta\mathrm{d}\tau\left[c^*(\tau)\left(\frac{\partial}{\partial\tau}-\mu\right)c(\tau)+H(c^*(\tau),c(\tau))\right]} \tag{7.3.22}$$

其中, $c=\{c_i\}$ 是整体符号.

式 (7.3.22) 定义了时间 (τ) 表象中的路径积分. 但我们可以在路径积分中改变基底 (即表象). 例如, 可借助于如下傅里叶级数引入常用的频率表象:

$$c(\tau)=\sum_n c_n\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_n\tau} \tag{7.3.23}$$

其中, ω_n 为松原频率. 我们在作用量及测度中, 可作替换 $\partial_\tau \to -\mathrm{i}\omega_n, \mathfrak{D}[c^*(\tau)c(\tau)] \to \mathfrak{D}[c_n^* c_n]$. 这样式 (7.3.22) 成为

$$Z = \int \mathfrak{D}[c_n^* c_n] \mathrm{e}^{-\beta \sum\limits_n c_n^*(-\mathrm{i}\omega_n - \mu)c_n + H(c_n^*, c_n)} \tag{7.3.24}$$

注意: 在实际计算中, 涉及松原频率求和时, 常出现收敛性问题, 因而式 (7.3.24) 此时不是真正定义得很好的. 我们必须根据具体构建积分的方式来引入恰当的收敛因子, 使得对松原频率求和时能给出有限的结果, 这可以由下面的例子看出.

例　考虑无相互作用粒子体系的配分函数和巨正则势.

此时哈密顿 $H(c_n^*, c_n) = \sum\limits_i \varepsilon_i c_{ni}^* c_{ni}$, 故

$$Z = \int \mathfrak{D}[c_n^* c_n] \mathrm{e}^{-\beta \sum\limits_{n,i} c_{ni}^*(-\mathrm{i}\omega_n + \varepsilon_i - \mu)c_{ni}} = \prod_{i,n} [\beta(-\mathrm{i}\omega_n + \varepsilon_i - \mu)]^{-\zeta} \tag{7.3.25}$$

其中, 对于玻色场 (费米场), $\zeta = 1(-1)$. 其巨正则势为

$$\varOmega = -\beta^{-1} \ln Z = \zeta \beta^{-1} \sum_{ni} \ln [\beta(-\mathrm{i}\omega_n + \varepsilon_i - \mu] \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n 0^+} \tag{7.3.26}$$

这里我们加进了一个小的收敛因子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n 0^+}$, 是因为从 $\tau = 0$ 到 $\tau = \beta$ 的时间演化等于从 $\tau = 0$ 到 $\tau = 0^-$ 的时间演化 (周期为 β). 这样

$$\varOmega = \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \sum_i \int_C \mathrm{d}z \frac{\mathrm{e}^{z 0^+}}{\mathrm{e}^{\beta z} - \zeta} \ln [\beta(-z + \varepsilon_i - \mu)] \tag{7.3.27}$$

注意到被积函数在实轴的区域 $(-\infty, \varepsilon_i - \mu)$ 上有一分支截割, 因而可采用如图 7.3.1 所示的围道. 由于在无穷大圆周上积分为零, 所以

$$\varOmega = \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \sum_i \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}z \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta z} - \zeta} \left\{ \ln \left[\beta(-z^+ + \varepsilon_i - \mu) \right] - \ln \left[\beta(-z^- + \varepsilon_i - \mu) \right] \right\} \tag{7.3.28}$$

其中, $z^\pm = z \pm \mathrm{i}0^+$. 我们还把积分区间从 $(-\infty, \varepsilon_i - \mu)$ 扩展到了 $(-\infty, \infty)$, 因为在 $(\varepsilon_i - \mu, \infty)$ 区域, 式 (7.3.28) 花括号内的值为零. 再利用恒等式

$$\frac{\beta}{\mathrm{e}^{\beta z} - \zeta} = \zeta \partial_z \ln \left(1 - \zeta \mathrm{e}^{-\beta z} \right) \tag{7.3.29}$$

将式 (7.3.29) 代入式 (7.3.28), 并进行分部积分得

$$\varOmega = -\frac{\zeta \beta^{-1}}{2\pi \mathrm{i}} \sum_i \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}z \ln \left(1 - \zeta \mathrm{e}^{-\beta z} \right) \left\{ \frac{1}{z^+ - \varepsilon_i + \mu} - \frac{1}{z^- - \varepsilon_i + \mu} \right\}$$

其中, $z^{\pm}=z\pm \mathrm{i}0^{+}$, 且花括号内表达式等于 $-2\pi\mathrm{i}\delta(z-\varepsilon_i+\mu)$. 故

$$\Omega=\zeta\beta^{-1}\sum_i \ln\left(1-\zeta\mathrm{e}^{-\beta(\varepsilon_i-\mu)}\right) \tag{7.3.30}$$

这正是无相互作用粒子体系的巨正则势的熟知表达式.

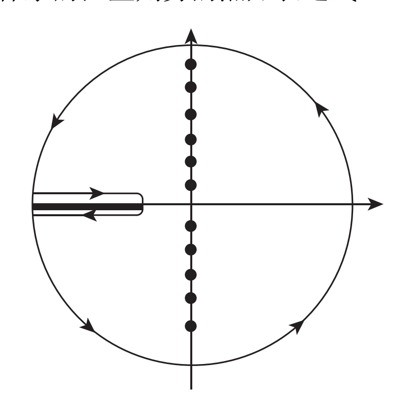


图 7.3.1　式 (7.3.27) 中所选积分围道

还可使用时间–空间坐标表象:

$$\psi(\underline{x},\tau)=\frac{1}{\sqrt{\beta V}}\sum_{\underline{p},n} c_{\underline{p}n}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\underline{p}\cdot\underline{x}-\omega_n\tau)} \tag{7.3.31}$$

这导致 $\mathfrak{D}[c^*_{\underline{p}n}c_{\underline{p}n}]\to\mathfrak{D}[\psi^*\psi]$. 此时有

$$Z=\int_{\psi(\underline{x},\beta)=\varsigma\psi(\underline{x},0)}\mathfrak{D}[\psi^*(\underline{x},\tau)\psi(\underline{x},\tau)]\mathrm{e}^{-S[\psi^*(\underline{x},\tau),\psi(\underline{x},\tau)]} \tag{7.3.32}$$

其中, **作用量泛函**为

$$\begin{aligned}&S[\psi^*(\underline{x},\tau),\psi(\underline{x},\tau)]\\ &\equiv\int_0^\beta \mathrm{d}\tau\int \mathrm{d}^3x\left[\psi^*(\underline{x},\tau)\left(\frac{\partial}{\partial\tau}-\mu\right)\psi(\underline{x},\tau)+H\left(\psi^*(\underline{x},\tau),\psi(\underline{x},\tau)\right)\right]\end{aligned} \tag{7.3.33}$$

三、格林函数的路径积分表述

由式 (7.1.83) 知, 路径积分能自动对应一个编时乘积, 所以格林函数也能直接用路径积分加以表述. 可以证明 (参见**附录 7B**)

$$\begin{aligned}g_{\lambda\lambda'}(\tau,\tau')&=-\langle T\hat{\psi}_\lambda(\tau)\hat{\psi}^+_{\lambda'}(\tau')\rangle\\ &=-\frac{1}{Z}\int\mathfrak{D}[\psi^*_\alpha(\tau)\psi_\alpha(\tau)]\psi_\lambda(\tau)\psi^*_{\lambda'}(\tau')\mathrm{e}^{-\int_0^\beta\mathrm{d}\tau\sum\limits_\alpha\left[\psi^*_\alpha\left(\frac{\partial}{\partial\tau}-\mu\right)\psi_\alpha+H(\psi^*_\alpha,\psi_\alpha)\right]}\end{aligned}$$

$$\equiv -\langle\psi_\lambda(\tau)\psi^+_{\lambda'}(\tau')\rangle_{\text{path}} \tag{7.3.34}$$

其中, $\langle\cdots\rangle_{\text{path}}$ 表示用路径积分途径中的泛函平均来定义的关联函数, 它与算符途径中的算符编时乘积的系综平均有着明显的对应关系:

$$\langle\phi(x_1)\phi(x_2)\cdots\phi(x_N)\rangle_{\text{path}} \equiv \frac{1}{Z}\int \mathfrak{D}\phi \mathrm{e}^{-S[\phi]}\phi(x_1)\phi(x_2)\cdots\phi(x_N) \Leftrightarrow$$
$$\langle T\hat{\phi}(x_1)\hat{\phi}(x_2)\cdots\hat{\phi}(x_N)\rangle \equiv g^{(N)}(x_1,x_2,\cdots,x_N) \tag{7.3.35}$$

知道了这种对应关系后, 我们**以后将略去下标 "path"**. 由第五章第七节知道, 有外源存在时的巨配分函数是格林函数的生成泛函, 而巨配分函数可以用路径积分来表示, 所以格林函数还可以方便地由对路径积分的泛函导数来求得.

作为一个例子, 我们来计算非相对论性自由玻色子体系的温度格林函数.

引入傅里叶变换 (7.3.31) 以及它的共轭式

$$\psi^*(\underline{x},\tau) = \frac{1}{\sqrt{\beta V}}\sum_{\underline{p},n} c^*_{\underline{p}n}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\underline{p}\cdot\underline{x}-\omega_n\tau)} \tag{7.3.36}$$

其中, $\omega_n = \dfrac{2\pi n}{\beta}$. 该体系的作用量为

$$S = \int_0^\beta \mathrm{d}\tau\int \mathrm{d}^3x\left[\psi^*(\underline{x},\tau)\left(\frac{\partial}{\partial\tau}-\mu\right)\psi(\underline{x},\tau)+\frac{1}{2m}\boldsymbol{\nabla}\psi^*(\underline{x},\tau)\boldsymbol{\nabla}\psi(\underline{x},\tau)\right]$$
$$= \sum_{\underline{p},n}\left(-\mathrm{i}\omega_n+\varepsilon^0_{\underline{p}}-\mu\right)c^*_{\underline{p}n}c_{\underline{p}n} \tag{7.3.37}$$

其中, $\varepsilon^0_{\underline{p}} = \dfrac{\underline{p}^2}{2m}$. 故有生成泛函

$$Z[J^*,J] = \int \mathfrak{D}[c^*_{\underline{p}n}c_{\underline{p}n}]\mathrm{e}^{-\sum\limits_{n,\underline{p}}\left[c^*_{\underline{p}n}\left(-\mathrm{i}\omega_n+\varepsilon^0_{\underline{p}}-\mu\right)c_{\underline{p}n}+J_{\underline{p}n}c^*_{\underline{p}n}+J^*_{\underline{p}n}c_{\underline{p}n}\right]}$$

由式 (7A.2.45) 知

$$Z[J^*,J] = \prod_{\underline{p}',n'}\frac{1}{-\mathrm{i}\omega_{n'}+\varepsilon^0_{\underline{p}'}-\mu}\mathrm{e}^{\sum\limits_{\underline{p},n}J^*_{\underline{p}n}\frac{1}{-\mathrm{i}\omega_n+\varepsilon^0_{\underline{p}}-\mu}J_{\underline{p}n}} \tag{7.3.38}$$

将生成泛函对源项求泛函导数可得出玻色子自由传播子

$$g^0(\underline{p},\mathrm{i}\omega_n) = -\left.\frac{\delta^2\ln Z[J^*,J]}{\delta J^*_{\underline{p}n}\delta J_{\underline{p}n}}\right|_{J^*=J=0} = \frac{1}{\mathrm{i}\omega_n-\varepsilon^0_{\underline{p}}+\mu} \tag{7.3.39}$$

这正是正则量子化途径中所熟知的结果.

这样, 非相对论自由玻色子体系的生成泛函可以写成

$$Z[J^*,J] = \int \mathfrak{D}[c^*_{\underline{p}n}c_{\underline{p}n}]\mathrm{e}^{-\sum\limits_{n,\underline{p}}\left[c^*_{\underline{p}n}[g^0(\underline{p},\mathrm{i}\omega_n)]^{-1}c_{\underline{p}n}+J_{\underline{p}n}c^*_{\underline{p}n}+J^*_{\underline{p}n}c_{\underline{p}n}\right]} \tag{7.3.40}$$

第四节　微扰展开: ϕ^4 相互作用

为了说明路径积分量子化途径中的图形微扰展开方法, 我们以 ϕ^4 相互作用的标量场为例子来加以说明. 这不仅因为它是能揭示相互作用场论许多共同特点的最简单的相互作用场论, 而且它本身也出现在许多应用中. 例如, ϕ^4 理论的作用量 $S[\phi]$ 可用来描述有一个序参量的经典模型的长程行为, $S[\phi]$ 常被称为**金兹堡–朗道自由能泛函.**

一、自由 (实) 标量场

我们考虑如下形式的实标量场的波动方程 (**克莱因–戈尔登方程**):

$$(\partial_\mu \partial^\mu - m^2)\phi(x) = 0 \tag{7.4.1}$$

其中, $x \equiv (\underline{x}, t)$; $\partial_\mu \partial^\mu \equiv \partial_t^2 - \boldsymbol{\nabla}^2$. 这个方程最初是用作描述一个自旋为零无荷电的相对论性自由粒子运动的方程 (在固体中, 它可描述长波光学声子). 事实上, 一个相对论性的自由粒子满足如下能量–动量关系:

$$E^2 = \underline{p}^2 + m^2 \tag{7.4.2}$$

在一次量子化中, 有

$$E \to \mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}, \quad \underline{p} \to -\mathrm{i}\boldsymbol{\nabla} \tag{7.4.3}$$

这样由式 (7.4.2) 和式 (7.4.3) 就可以建立起式 (7.4.1).

在量子场论的正则途径中, 我们用第一章中类似方法可以得知, 若让 $\phi(x) \to \hat{\phi}(x)$, 就能把式 (7.4.1) 看成量子场方程, 其中, $\hat{\phi}(x)$ 是场算符. 式 (7.4.1) 的 (连续归一化的) 平面波解为

$$\frac{1}{\sqrt{2\omega_{\underline{p}}(2\pi)^3}}\mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}p\cdot x}$$

其中, $px = \omega_p t - \underline{p}\cdot\underline{x}$; $\omega_p \equiv \sqrt{\underline{p}^2 + m^2}$. 与薛定谔方程不同的是, 克莱因–戈尔登方程有时间的二阶导数项, 而不是时间的一阶导数项, 故它的平面波解是两组而不是一组. 这样可将场算符表达成

$$\hat{\phi}(x) = \int \mathrm{d}^3 p \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\underline{p}}(2\pi)^3}}\left(a_{\underline{p}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p\cdot x} + a_{\underline{p}}^{+}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p\cdot x}\right) \tag{7.4.4}$$

其中, $a_{\underline{p}}$ 和 $a_{\underline{p}}^{+}$ 分别是标量粒子的消灭和产生算符.

在路径积分量子化途径中, 我们考虑由式 (7.4.1) 所对应的经典拉氏密度:

$$\mathfrak{L}_0 = \frac{1}{2}\partial_\mu\phi\partial^\mu\phi(x) - \frac{m^2}{2}\phi^2(x) \tag{7.4.5}$$

它的 (实时) 作用量泛函为 $S_0[\phi] = \int \mathrm{d}t\mathrm{d}^d x\mathfrak{L}_0$, 这里为了普遍性考虑 $D \equiv d+1$ 维的时空. 当我们考虑有限温度下的欧氏作用量时, 应该让 $t \to -\mathrm{i}\tau$, 则得到

$$S_0[\phi] = \int \mathrm{d}^D x \left[\frac{1}{2}\left(\frac{\partial\phi}{\partial\tau}\right)^2 + \frac{1}{2}(\boldsymbol{\nabla}\phi)^2 + \frac{m^2}{2}\phi^2\right] \tag{7.4.6}$$

其中, 场量 $\phi \equiv \phi(\underline{x},\tau) \equiv \phi(x)$(这里仍用 x 来表示欧氏空间中的坐标), 且 $\int \mathrm{d}^D x \equiv \int_0^\beta \mathrm{d}\tau \int \mathrm{d}^d x$. 这样, 其配分函数可表达为如下路径积分形式:

$$Z_0 = \int \mathfrak{D}\phi \mathrm{e}^{-S_0[\phi]} \tag{7.4.7}$$

由前面知道, 利用生成泛函 $Z_0[J]$ 可以得到自由粒子格林函数

$$Z_0[J] \equiv \int \mathfrak{D}\phi \mathrm{e}^{-S_0[\phi,J]} \tag{7.4.8}$$

其中

$$S_0[\phi,J] = S_0[\phi] - \int \mathrm{d}^D x J(x)\phi(x) \tag{7.4.9}$$

根据式 (7A.2.2) 知道

$$Z_0[J] = Z_0[0]\mathrm{e}^{\frac{1}{2}\int \mathrm{d}^D x \mathrm{d}^D y J(x)\mathit{\Delta}(x-y)J(y)} \tag{7.4.10}$$

其中, $\mathit{\Delta}(x-y)$ 是算符 $-\partial^2 + m^2 \equiv -\left(\frac{\partial^2}{\partial\tau^2} + \boldsymbol{\nabla}^2\right) + m^2$ 的逆, 满足方程

$$(-\partial^2 + m^2)\mathit{\Delta}(x-y) = \delta^D(x-y) \tag{7.4.11}$$

该方程的解为

$$\mathit{\Delta}(x-y) = \frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}\frac{1}{(2\pi)^d}\int \mathrm{d}^d p\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}p\cdot(x-y)}}{p^2+m^2} \tag{7.4.12}$$

其中, 动量 $p \equiv (\underline{p},\omega_n)$, ω_n 为松原频率, 在欧氏空间中 $p^2 \equiv \underline{p}^2 + \omega_n^2$. 由生成泛函可求得自由粒子的 N 点关联函数 (或 N 点格林函数)$g_0^{(N)}$:

$$g_0^{(N)} \equiv \langle\phi(x_1)\phi(x_2)\cdots\phi(x_N)\rangle_0 \equiv \frac{1}{Z_0}\int \mathfrak{D}\phi \mathrm{e}^{-S_0[\phi]}\phi(x_1)\phi(x_2)\cdots\phi(x_N)$$

$$= \frac{1}{Z_0[0]} \frac{\delta^N Z_0[J]}{\delta J(x_1)\delta J(x_2)\cdots\delta J(x_N)}\bigg|_{J(x_1)=J(x_2)=\cdots=J(x_N)=0} \tag{7.4.13}$$

当 $N=2$ 时, 可得自由粒子的松原函数, 按我们以前的记号为

$$\begin{aligned} g^0(x,x') &\equiv -g_0^{(2)}(x,x') \equiv -\langle\phi(x)\phi(x')\rangle_0 \\ &= -\frac{1}{Z_0[0]}\frac{\delta^2 Z_0[J]}{\delta J(x)\delta J(x')}\bigg|_{J=0} = -\Delta(x-x') \end{aligned} \tag{7.4.14}$$

将式 (7.4.10) 代入式 (7.4.13), 就得到**路径积分表述中的 Wick 定理**(参见式 (7A.2.5)):

$$\left\langle \prod_{i=1}^{2s}\phi(x_i)\right\rangle_0 = \sum_{\substack{\{1,2,\cdots,2s\} \\ \text{的所有可能配对}}} \Delta(x_{i_1},x_{i_2})\Delta(x_{i_2},x_{i_3})\cdots\Delta(x_{i_{2s-1}},x_{i_{2s}}) \tag{7.4.15}$$

二、ϕ^4 相互作用

当存在 ϕ^4 相互作用时, 则作用量为

$$S[\phi] = \int \mathrm{d}^D x\left[\frac{1}{2}\left(\frac{\partial\phi}{\partial\tau}\right)^2 + \frac{1}{2}(\boldsymbol{\nabla}\phi)^2 + \frac{m^2}{2}\phi^2 + \frac{\lambda}{4!}\phi^4\right] \tag{7.4.16}$$

其中, $\lambda > 0$. 值得注意的是, 若场量不是标量场而是有 r 个分量的矢量场 $\varPhi = (\varPhi_1,\varPhi_2,\cdots,\varPhi_r)$, $\varPhi^2 = \varPhi_1^2 + \varPhi^2 + \cdots + \varPhi_r^2$. 并且若我们将 ϕ^4 相互作用改成 $\dfrac{\lambda}{4!}\left(\varPhi^2\right)^2$, 即若作用量为

$$S[\varPhi] = \int \mathrm{d}^D x\left[\frac{1}{2}\left(\frac{\partial\varPhi}{\partial\tau}\right)^2 + \frac{1}{2}(\boldsymbol{\nabla}\varPhi)^2 + \frac{m^2}{2}\varPhi^2 + \frac{\lambda}{4!}\left(\varPhi^2\right)^2\right] \tag{7.4.17}$$

则得到所谓的**对称矢量模型**. 有 ϕ^4 相互作用的标量场理论是它当 $r=1$ 时的特例. 当 $r=2$ 时, 该矢量模型可描述超导和超流相变, 而当 $r=3$ 时可描述铁磁相变等. 由于它们有相似的数学结构, 所以我们以更简单的标量场为例来介绍. 而对矢量场的情形仅加以比较说明.

三、微扰展开: 格林函数的生成泛函

当存在相互作用时, 生成泛函 $Z[J]$ 为

$$Z[J] \equiv \int \mathfrak{D}\phi\, \mathrm{e}^{-S[\phi,J]} \tag{7.4.18}$$

其中

$$S[\phi,J] = S[\phi] - \int \mathrm{d}^D x J(x)\phi(x) \tag{7.4.19}$$

借助于 $Z_0[J]$, 可以将 $Z[J]$ 表达成

$$Z[J]=\mathrm{e}^{-\frac{\lambda}{4!}\int \mathrm{d}^D x \frac{\delta^4}{\delta J(x)^4}} Z_0[J] \tag{7.4.20}$$

则相互作用体系的 N 点格林函数为

$$\begin{aligned} g^{(N)}(x_1,x_2,\cdots,x_N) &\equiv \langle\phi(x_1)\phi(x_2)\cdots\phi(x_N)\rangle \\ &= \frac{1}{Z[0]}\frac{\delta^N Z[J]}{\delta J(x_1)\delta J(x_2)\cdots\delta J(x_N)}\bigg|_{J(x_1)=J(x_2)=\cdots=J(x_N)=0} \end{aligned} \tag{7.4.21}$$

这种格林函数的费曼图含有不连通图. 但 $\ln Z[J]$ 却是N**点连通格林函数**的生成泛函:

$$\begin{aligned} g_{\mathrm{C}}^{(N)}(x_1,x_2,\cdots,x_N) &\equiv \langle\phi(x_1)\phi(x_2)\cdots\phi(x_N)\rangle_{\mathrm{C}} \\ &= \frac{\delta^N \ln Z[J]}{\delta J(x_1)\delta J(x_2)\cdots\delta J(x_N)}\bigg|_{J(x_1)=J(x_2)=\cdots=J(x_N)=0} \end{aligned} \tag{7.4.22}$$

其中, 标号 C 是指连通的含义.

我们可以用以下几种方法来建立 ϕ^4 理论的费曼规则.

方法 1: 利用 Wick 定理式 (7.4.15).

因为

$$g^{(N)}(x_1,x_2,\cdots,x_N)=\frac{\displaystyle\int \mathfrak{D}\phi \mathrm{e}^{-S_0[\phi]+\int \mathrm{d}^D x \frac{\lambda}{4!}\phi^4}\phi(x_1)\phi(x_2)\cdots\phi(x_N)}{\displaystyle\int \mathfrak{D}\phi \mathrm{e}^{-A_0[\phi]+\int \mathrm{d}^D x\frac{\lambda}{4!}\phi^4}} \tag{7.4.23}$$

式中, 分子有如下展开式:

$$\sum_j \int \mathfrak{D}\phi \mathrm{e}^{-S_0[\phi]}\phi(x_1)\phi(x_2)\cdots\phi(x_N)\frac{1}{j!}\left[\int \mathrm{d}^D y \frac{\lambda}{4!}\phi^4(y)\right]^j \tag{7.4.24}$$

而式 (7.4.23) 中的分母的唯一效应是消去分子中所有真空图效应, 这点和正则途径中的情形相似. 这样我们只需考虑将 Wick 定理施加于如下表达式:

$$\sum_j \frac{1}{j!}\left[\int \mathrm{d}^D y_1 \mathrm{d}^D y_2\cdots \mathrm{d}^D y_j\left(\frac{\lambda}{4!}\right)^j\right]\langle\phi(x_1)\phi(x_2)\cdots\phi(x_N)\phi^4(y_1)\phi^4(y_2)\cdots\phi^4(y_j)\rangle_0 \tag{7.4.25}$$

并忽略其中对应真空图的项.

例如, 对于两点格林函数 $g(x_1,x_2)\equiv g^{(2)}(x_1,x_2)$, 我们在式 (7.4.25) 中取 $N=2$, 则有

(1) λ 的零阶项 ($j=0$): 式 (7.4.25) 给出自由传播子

$$g^0(x_1,x_2)\equiv-\langle\phi(x_1)\phi(x_2)\rangle_0=-\Delta(x_1-x_2)$$

其图形表示为

x_1 ———— x_2　　$\Delta(x_1-x_2)$

(2) λ 的一阶项 ($j=1$): 利用式 (7.4.25) 可得 $g(x_1,x_2)$ 的一阶修正为

$$-\frac{\lambda}{2}\int \mathrm{d}^D y\Delta(x_1-y)\Delta(x_2-y)\Delta(0) \tag{7.4.26}$$

其图形如图 7.4.1(a) 所示. 在获得式 (7.4.26) 时, 我们已忽略掉真空图 7.4.1(b) 所对应的有真空图的项. 如此等. 由于这与正则量子化途径中的类似方法相似, 所以我们着重讨论第二种方法.

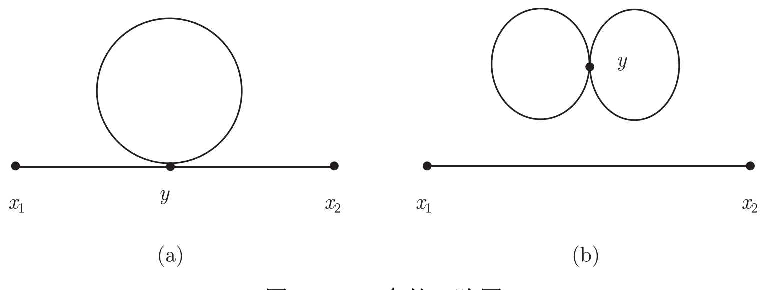


图 7.4.1　ϕ^4 的一阶图

方法 2: 将式 (7.4.20) 作为微扰展开的出发点. 连同式 (7.4.22) 我们将给出连通格林函数的费曼规则.

以下为简化符号和计算, 采用广义爱因斯坦规约, 重复指标自动积分, 例如, $\dfrac{\delta^4}{\delta J_x^4}\equiv\displaystyle\int \mathrm{d}^D x\frac{\delta^4}{\delta J(x)^4}$, 则有

$$Z[J]=\mathrm{e}^{-\frac{\lambda}{4!}\frac{\delta^4}{\delta J_x^4}}Z_0[J]=Z_0[0]\mathrm{e}^{-\frac{\lambda}{4!}\frac{\delta^4}{\delta J_x^4}}\mathrm{e}^{\frac{1}{2}J_y\Delta_{yz}J_z} \tag{7.4.27}$$

令

$$W_0\equiv\frac{1}{2}J_y\Delta_{yz}J_z,\quad \delta\equiv\mathrm{e}^{-W_0}\left(\mathrm{e}^{-\frac{\lambda}{4!}\frac{\delta^4}{\delta J_x^4}}-1\right)\mathrm{e}^{W_0} \tag{7.4.28}$$

则有

$$Z[J]=Z_0[0]\mathrm{e}^{W_0}(1+\delta) \tag{7.4.29}$$

故

$$\ln Z[J]=\ln Z_0[0]+W_0+\ln(1+\delta)$$

$$= \ln Z_0[0] + W_0 + \delta - \frac{\delta^2}{2} + \frac{\delta^3}{3} + \cdots \tag{7.4.30}$$

由式 (7.4.28) 知, 可设

$$\delta = \delta_1\lambda + \delta_2\lambda^2 + \delta_3\lambda^3 + \cdots \tag{7.4.31}$$

代入式 (7.4.30) 得

$$\ln Z[J] = \ln Z_0[0] + W_0 + \lambda\delta_1 - \lambda^2\left(\delta_2 - \frac{1}{2}\delta_1^2\right) - \lambda^3\left(\delta_3 - \delta_1\delta_2 + \frac{1}{3}\delta_1^3\right) + \cdots \tag{7.4.32}$$

将式 (7.4.28) 中的 δ 展开, 依次可得

$$\delta_1 = -\frac{1}{4!}\mathrm{e}^{-W_0}\frac{\mathrm{\delta}^4}{\mathrm{\delta} J_x^4}\mathrm{e}^{W_0} \tag{7.4.33}$$

$$\delta_2 = \frac{1}{2(4!)^2}\mathrm{e}^{-W_0}\frac{\mathrm{\delta}^4}{\mathrm{\delta} J_x^4}\frac{\mathrm{\delta}^4}{\mathrm{\delta} J_y^4}\mathrm{e}^{W_0}\cdots \tag{7.4.34}$$

作具体的泛函导数计算:

$$\frac{\mathrm{\delta}}{\mathrm{\delta} J_x}\mathrm{e}^{W_0} = \frac{\mathrm{\delta}}{\mathrm{\delta} J_x}\mathrm{e}^{\frac{1}{2}J_a\varDelta_{ab}J_b} = \varDelta_{xa}J_a\mathrm{e}^{W_0}$$

$$\frac{\mathrm{\delta}^2}{\mathrm{\delta} J_x^2}\mathrm{e}^{W_0} = (\varDelta_{xx} + \varDelta_{xa}\varDelta_{xb}J_aJ_b)\mathrm{e}^{W_0}$$

$$\frac{\mathrm{\delta}^3}{\mathrm{\delta} J_x^3}\mathrm{e}^{W_0} = (3\varDelta_{xx}\varDelta_{xa}J_a + \varDelta_{xa}\varDelta_{xb}\varDelta_{xc}J_aJ_bJ_c)\mathrm{e}^{W_0}$$

$$\frac{\mathrm{\delta}^4}{\mathrm{\delta} J_x^4}\mathrm{e}^{W_0} = (3\varDelta_{xx}^2 + 6\varDelta_{xx}\varDelta_{xa}\varDelta_{xb}J_aJ_b + \varDelta_{xa}\varDelta_{xb}\varDelta_{xc}\varDelta_{xd}J_aJ_bJ_cJ_d)\mathrm{e}^{W_0} \tag{7.4.35}$$

故

$$\delta_1 = -\frac{1}{4!}(3\varDelta_{xx}^2 + 6\varDelta_{xx}\varDelta_{xa}\varDelta_{xb}J_aJ_b + \varDelta_{xa}\varDelta_{xb}\varDelta_{xc}\varDelta_{xd}J_aJ_bJ_cJ_d) \tag{7.4.36}$$

类似可算 δ_2, δ_3 等, 再由式 (7.4.32) 和式 (7.4.22) 可得出连通格林函数. 例如, 两点连通格林函数为

$$\begin{aligned}-g(x_1,x_2) \equiv & g_{\mathrm{C}}^{(2)}(x_1,x_2) \equiv \langle\phi(x_1)\phi(x_2)\rangle_{\mathrm{C}} \\ = & \varDelta(x_1-x_2) - \frac{\lambda}{2}\int \mathrm{d}^D y\varDelta(x_1-y)\varDelta(y-y)\varDelta(y-x_2) \\ & + \frac{\lambda^2}{6}\int \mathrm{d}^D x\mathrm{d}^D y\varDelta(x_1-x)\varDelta^3(x-y)\varDelta(y-x_2)\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&+\frac{\lambda^2}{4}\int \mathrm{d}^D x\mathrm{d}^D y\varDelta(x_1-x)\varDelta^2(x-y)\varDelta(y-y)\varDelta(x-x_2)\\
&+\frac{\lambda^2}{4}\int \mathrm{d}^D x\mathrm{d}^D y\varDelta(x_1-x)\varDelta(x-x)\varDelta(x-y)\varDelta(y-y)\varDelta(y-x_2)\\
&+0(\lambda^3)
\end{aligned}
\tag{7.4.37}
$$

四点连通格林函数为

$$
\begin{aligned}
g_{\mathrm{C}}^{(4)}(x_1,x_2)\equiv&\langle\phi(x_1)\phi(x_2)\phi(x_3)\phi(x_4)\rangle_{\mathrm{C}}\\
=&-\lambda\int \mathrm{d}^D x\varDelta(x_1-x)\varDelta(x_2-x)\varDelta(x_3-x)\varDelta(x_4-x)\\
&+\frac{\lambda^2}{2}\int \mathrm{d}^D x\mathrm{d}^D y\varDelta^2(x-y)[\varDelta(x_1-x)\varDelta(x_2-x)\varDelta(x_3-y)\varDelta(x_4-y)\\
&+\varDelta(x_1-x)\varDelta(x_3-x)\varDelta(x_2-y)\varDelta(x_4-y)\\
&+\varDelta(x_1-x)\varDelta(x_4-x)\varDelta(x_2-y)\varDelta(x_3-y)]\\
&+\frac{\lambda^2}{2}\int \mathrm{d}^D x\mathrm{d}^D y\varDelta(y-y)\varDelta(x-y)\\
&\cdot[\varDelta(x_1-x)\varDelta(x_2-x)\varDelta(x_3-x)\varDelta(x_4-y)+\text{循环置换项}]\\
&+0(\lambda^3)
\end{aligned}
\tag{7.4.38}
$$

等. 利用傅里叶变换还可以给出它们所对应的动量空间中的格林函数. 这样, 可以总结出位置空间和动量空间中的费曼规则. 由于这两种空间中的费曼规则大同小异, 我们仅给出**动量空间中的**N**点连通格林函数**$g_{\mathrm{C}}^{(N)}(p_1,p_2,\cdots,p_N)$**的费曼规则**, 它更为实用, 这里

$$
\begin{aligned}
&g_{\mathrm{C}}^{(N)}(p_1,p_2,\cdots,p_N)\beta(2\pi)^d\delta^D(p_1+p_2+\cdots+p_N)\\
\equiv&\int \mathrm{d}^D x_1\mathrm{d}^D x_2\cdots\mathrm{d}^D x_N\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(p_1x_1+p_2x_2+\cdots+p_Nx_N)}g_{\mathrm{C}}^{(N)}(x_1,x_2,\cdots,x_N)
\end{aligned}
$$

即 $g_{\mathrm{C}}^{(N)}(p_1,p_2,\cdots,p_N)$ 是定义于能量动量守恒 $p_1+p_2+\cdots+p_N=0$ 满足时.

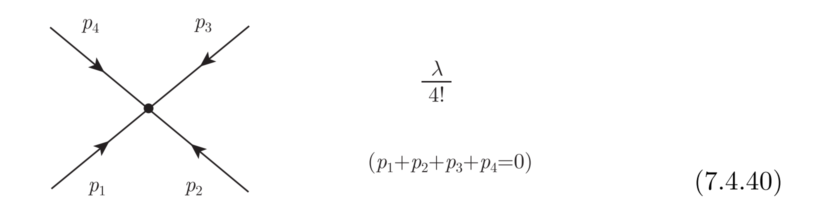
(1) 有 N 个外顶点 (N 为偶数, 若为奇数则格林函数为零), 内顶点数等于微扰展开的阶数.

(2) 每两个顶点之间连线代表自由传播子, 其图形表示及其贡献为

p

$$
\frac{1}{p^2+m^2}
\tag{7.4.39}
$$

(3) 每个内顶点, 给出一个因子 $\lambda/4!$. 每个内顶点上有 4 条腿 (粒子线) 且流入顶点的净动量为零, 即



$$(7.4.40)$$

(4) 画出所有拓扑不等价图. 一个给定图能画出的方式数是该图形的拓扑权重.

(5) 对每个内圈动量积分 (包括对内频率求和): $\dfrac{1}{\beta}\sum\limits_{\omega_n}\displaystyle\int\frac{\mathrm{d}^d p}{(2\pi)^d}$.

(6) 对阶 j 求和.

按上述规则, 二阶近似下的松原函数的费曼图如图 7.4.2 所示.

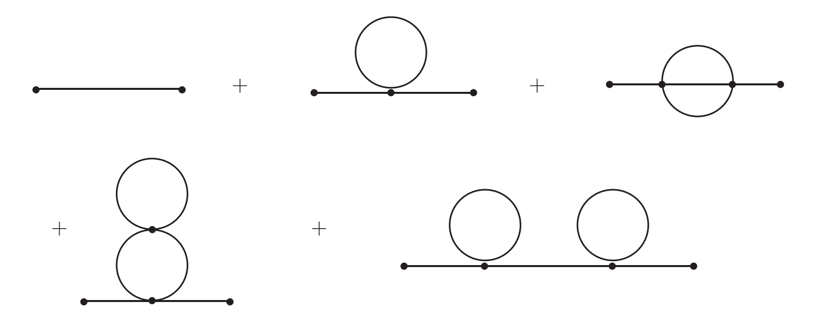
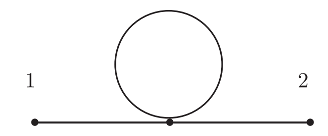


图 7.4.2　松原函数的二阶近似下的费曼图

图 7.4.2 中, 第一图为零阶图, 代表自由传播子, 其贡献为 $\dfrac{1}{p^2+m^2}$.

第二图是一阶图, 其拓扑权重可如下判断:

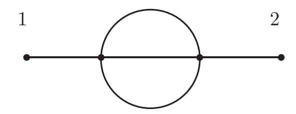


该图有一个内顶点, 将它的第一条腿接到外顶点 1 上有四种方式, 而将它的第二条腿接到外顶点 2 上有三种方式. 故该图的拓扑权重是 12, $\dfrac{\lambda}{4!}\times 12=\dfrac{\lambda}{2}$. 这样按费曼规则, 该图的贡献为

$$\frac{\lambda}{2}\frac{1}{(p^2+m^2)^2}\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}\int\frac{\mathrm{d}^d p}{(2\pi)^d}\frac{1}{q^2+m^2}$$

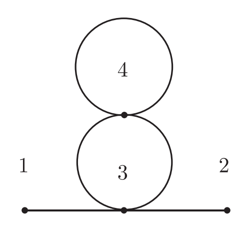
其中, $q\equiv(\underline{q},\omega_n)$ 为圈动量.

第三 $\sim$ 五图都为二阶图. 第三图的拓扑权重可如下判断:



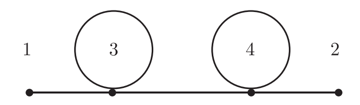
该图有两个内顶点, 将第一个内顶点的第一条腿接到外顶点 1 上有四种方式, 将第二个内顶点的第一条腿接到外顶点 2 上也有四种方式. 然后将第一个内顶点的第二条腿接到第二个内顶点的腿上有三种方式, 再将第一个内顶点的第二条腿接到第二个内顶点的腿上有两种方式. 故拓扑权重是 96, $\dfrac{\lambda}{4!}\times\dfrac{\lambda}{4!}\times 96=\dfrac{\lambda^2}{6}$.

第四图为



对于该图, 将内顶点 3 的第一条腿接到外顶点 1 有四种方式, 将第二条腿接到外顶点 2 上有三种方式, 将第三条腿接到内顶点 4 的腿上有四种方式, 将内顶点 3 的第四条腿接到内顶点 4 的腿上有三种方式. 故拓扑权重为 144, $\dfrac{\lambda}{4!}\times\dfrac{\lambda}{4!}\times 144=\dfrac{\lambda^2}{4}$.

第五图为



将内顶点 3 的第一条腿接到外顶点 1 上有四种方式, 将内顶点 4 的第一条腿接到外顶点 2 上也有四种方式. 这样每个内顶点都还各自剩下三条腿, 这两个内顶点连接起来就有九种方式. 每个内点所剩的两条腿再连接成圈. 故拓扑权重与第四图同为 144, 贡献 $\dfrac{\lambda^2}{4}$.

这样, 松原函数的解析式为

$$
\begin{aligned}
&g(p,-p)\\
=&-\frac{1}{p^2+m^2}+\frac{\lambda}{2}\frac{1}{(p^2+m^2)^2}\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}\int\frac{\mathrm{d}^dp}{(2\pi)^d}\frac{1}{q^2+m^2}\\
&-\frac{\lambda^2}{6}\frac{1}{(p^2+m^2)^2}\frac{1}{\beta^3}\sum_{\omega_1,\omega_2,\omega_3}\int\frac{\mathrm{d}^dq_1}{(2\pi)^d}\frac{\mathrm{d}^dq_2}{(2\pi)^d}\frac{\mathrm{d}^dq_3}{(2\pi)^d}\frac{\beta(2\pi)^3\delta(p-q_1-q_2-q_3)}{(q_1^2+m^2)(q_2^2+m^2)(q_3^2+m^2)}\\
&-\frac{\lambda^2}{4}\frac{1}{(p^2+m^2)^2}\frac{1}{\beta^3}\sum_{\omega,\omega_1,\omega_2}\int\frac{\mathrm{d}^dq}{(2\pi)^d}\frac{\mathrm{d}^dq_1}{(2\pi)^d}\frac{\mathrm{d}^dq_2}{(2\pi)^d}\frac{\beta(2\pi)^3\delta(p-q_1-q_2)}{(q^2+m^2)(q_1^2+m^2)(q_2^2+m^2)}
\end{aligned}
$$

$$- \frac{\lambda^2}{4} \frac{1}{(p^2+m^2)^2} \frac{1}{\beta^2} \sum_{\omega_1,\omega_2} \int \frac{\mathrm{d}^d q_1}{(2\pi)^d} \frac{\mathrm{d}^d q_2}{(2\pi)^d} \frac{1}{(q_1^2+m^2)(p^2+m^2)(q_2^2+m^2)}$$
$$+ 0(\lambda^3) \tag{7.4.41}$$

类似可以给出四点连通格林函数, 其二阶近似下的费曼图如图 7.4.3 所示.

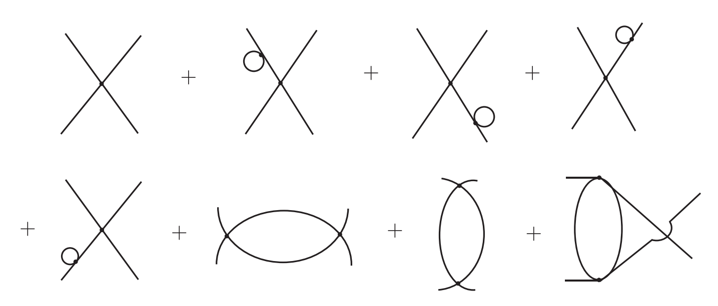


图 7.4.3　二阶近似下的四点连通格林函数图

虽然连通格林函数的生成泛函 $W[J] \equiv \ln Z[J]$ 导致的微扰展开结构比 $Z[J]$ 简单, 它仅有连通图的贡献, 然而其中仍有单粒子可约图的贡献, 例如, 图 7.4.3 中第二个图形直到第五个图形均为单粒子可约图. 那些造成可约性的单粒子线只传递外动量, 不带来新的积分, 从而不包含新内容, 因此应当想办法消去. 这可以通过作勒让德变换, 引入单粒子不可约顶角泛函来实现.

四、微扰展开: 不可约顶角的生成泛函

定义场量 $\bar{\varphi}(x)$ 为

$$\bar{\varphi}(x) = \frac{\delta W}{\delta J(x)} = \frac{1}{Z} \frac{\delta Z}{\delta J(x)} = \langle \varphi \rangle_J \tag{7.4.42}$$

这个定义式反过来又给出 $\bar{\varphi}$ 作为 J 的泛函. 作勒让德变换:

$$\Gamma[\bar{\varphi}] = \int \mathrm{d}^D x J(x) \bar{\varphi}(x) - W[J] \Big|_{J=J[\bar{\varphi}]} \tag{7.4.43}$$

其中, J 是从式 (7.4.42) 中反解出来的 $J[\bar{\varphi}]$, 它是 $\bar{\varphi}$ 的泛函; $\Gamma[\bar{\varphi}]$ 称为**有效作用量**(或**有效势**). 由于

$$\begin{aligned} \frac{\delta \Gamma[\bar{\varphi}]}{\delta \bar{\varphi}(x)} &= \int \mathrm{d}^D y \left[\frac{\delta J(y)}{\delta \bar{\varphi}(x)} \bar{\varphi}(y) + J(y) \delta(y-x) \right] - \int \mathrm{d}^D y \frac{\delta W[J]}{\delta J(y)} \frac{\delta J(y)}{\delta \bar{\varphi}(x)} \\ &= J(x) \end{aligned} \tag{7.4.44}$$

由上式知, $\Gamma[\bar{\varphi}]$ 在 $J=0$ 时具有极值性质:

$$\frac{\delta \Gamma}{\delta \bar{\varphi}} \Big|_{J=0} = 0 \tag{7.4.45}$$

从式 (7.4.42) 可知

$$\bar{\varphi}(x)|_{J=0} = \langle\varphi(x)\rangle = g^{(1)} \tag{7.4.46}$$

故 $J=0$ 等价于 $\bar{\varphi}=g^{(1)}$. 这样, $\Gamma[\bar{\varphi}]$ 的解析泛函展开式可以表达成

$$\Gamma[\bar{\varphi}] = \sum_{N=2}^{\infty} \frac{1}{N!}\Gamma^{(N)} \cdot \left[\bar{\varphi} - g^{(1)}\right]^N \tag{7.4.47}$$

其中

$$\Gamma^{(N)}(x_1, x_2, \cdots, x_N) = \left.\frac{\delta^N \Gamma[\bar{\varphi}]}{\delta\bar{\varphi}(x_1)\delta\bar{\varphi}(x_2)\cdots\delta\bar{\varphi}(x_N)}\right|_{\bar{\varphi}=g^{(1)}} \tag{7.4.48}$$

式中, 求和是从 $N=2$ 开始的. 原因如下:

若采用归一化条件 $Z[J=0]=1$, 则导致 $W[0]=0$, 这样再加上式 (7.4.43) 知

$$\Gamma^{(0)} = 0 \tag{7.4.49}$$

而由式 (7.4.45) 知

$$\Gamma^{(1)} = 0 \tag{7.4.50}$$

$\Gamma^{(N)}(x_1, x_2, \cdots, x_N)$ 称为正规顶角函数 (或不可约顶角函数). 在平移不变情形, 它们只依赖于差 $x_i - x_j$, 故可引入如下傅里叶变换:

$$\begin{aligned}
&\Gamma^{(N)}(p_1, p_2, \cdots, p_N)(2\pi)^D \delta^D(p_1 + p_2 + \cdots + p_N) \\
&= \int \mathrm{d}^D x_1 \mathrm{d}^D x_2 \cdots \mathrm{d}^D x_N \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(p_1 x_1 + p_2 x_2 + \cdots + p_N x_N)} \Gamma^{(N)}(x_1, x_2, \cdots, x_N)
\end{aligned} \tag{7.4.51}$$

不可约顶角函数的一个重要性质是: $\Gamma^{(2)}$ 是两点格林函数 $g^{(2)} \equiv g_{\mathrm{c}}^{(2)}$ 的逆. 为了使得证明更加简洁, 我们现在采用附录 7A 中所采用的广义矩阵和广义爱因斯坦规约. 因为 $\dfrac{\delta J}{\delta J} = 1$, 故插入对 $\bar{\varphi}$ 的变分, 再由 $\bar{\varphi}$ 和 J 的定义式 (7.4.42) 和式 (7.4.44) 得

$$\frac{\delta J}{\delta\bar{\varphi}} \frac{\delta\bar{\varphi}}{\delta J} = 1 \tag{7.4.52}$$

$$\frac{\delta^2 \Gamma}{\delta\bar{\varphi}^2} \frac{\delta^2 W}{\delta J^2} = 1 \tag{7.4.53}$$

即

$$\Gamma^{(2)} = (g^{(2)})^{-1} \tag{7.4.54}$$

注意: $\Gamma^{(N)}$ 是单粒子不可约的, 例如, $\Gamma^{(4)}$ 仅含如图 7.4.4 所示图形.

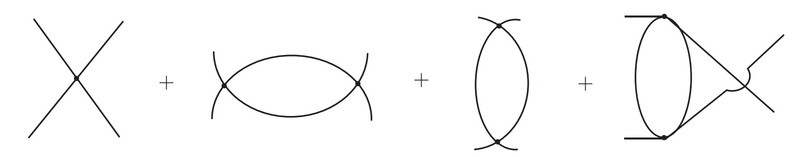


图 7.4.4　不可约顶角 $\rho^{(4)}$ 的费曼图

与图 7.4.3 中的 $g^{(4)}$ 相比较, 它少了其中四个单粒子可约图. 为了证明 $\Gamma^{(N)}$ 是单粒子可约的, 方便的是运用定义式 (7.4.42) 和式 (7.4.44), 然后反复对它们求导, 这里不再详述.

第五节　应用: 超导电性及其 BCS 理论

低温下直流电阻消失的性质叫**超导电性**, 具有超导电性的材料叫**超导体**, 它具有如下一些基本属性:

(1) 超导态是一种新的凝聚态, 特别是在 $T=0$ 时, 它是一种类似于超流 ^{4}He 的宏观量子态. 其中, 电子发生了某种有序变化, 这种有序是长程序.

(2) 超导态中电子能谱中存在能隙.

(3) 同位素实验表明超导转变与电子–声子相互作用有关.

有两类超导体, 第一类对于弱磁场 ($H<H_{\rm C}(T)$) 是完全抗磁体, 即材料内部 $\underline{B}=0$, 这是所谓的**迈斯纳 (Meissner) 效应**. 它是由外场感生出的表面电流所产生的效应, 但存在一个临界磁场 $H_{\rm C}(T)$, 当外磁场超过它后, 磁力线仍可透入材料内部. 对于第二类超导体 (如某些超导合金), 磁场可以透入超导体内部, 而不破坏超导特性.

对于超导体, 临界磁场 $H_{\rm C}(T)$ 和临界温度 $T_{\rm C}$ 是两个最重要的参量, 一旦超过它们, 超导性就会被破坏.

作为对路径积分量子化途径的应用举例, 本节仅涉及 BCS 超导理论适用的**常规超导体**(又称为**BCS 超导体**).

一、BCS 哈密顿、有效作用量

固体中电子和声子之间存在相互作用, 而且电子之间通过交换虚声子产生的有效作用在费米面附近能壳内 (壳厚 $\sim\omega_{\rm D}$) 为吸引作用, 其中, $\omega_{\rm D}$ 为声子的德拜频率, 它是声子激发的特征标度. 如果电子–声子的耦合常数适当地大, 则该吸引作用有可能超过电子之间的库仑排斥作用, 从而产生电子之间的 “净” 吸引作用.

不论这种电子之间的 “净” 吸引作用多么弱, 结果都会形成电子对束缚态 (**配对态**), 配对态中的两个电子具有大小相等而方向相反的动量且自旋相反, 记为 $|\underline{k}\uparrow, -\underline{k}\downarrow\rangle$, 这种电子对叫**Cooper 对.** 计算表明, 两电子之间的吸引势所引起的势能降

低使得电子对的总能量 $E < 2E_f$. 可以预期 Cooper 对的存在使得出现一种费米海的不稳定性, 从而使系统进入比费米海能量更低的稳定态——超导基态. 总之, BCS 超导理论认为超导的本质特征是由 Cooper 对关联所引起的, 从而取 $|\underline{k}\uparrow, -\underline{k}\downarrow\rangle$ 配对态来处理这种对关联.

基于上述考虑, Bardeen、Cooper 和 Schriffer 取常规超导体的模型哈密顿 (**BCS 哈密顿**) 为

$$\hat{H} = \sum_{\underline{k}\sigma} \varepsilon_{\underline{k}\sigma} \hat{c}^{+}_{\underline{k}\sigma} \hat{c}_{\underline{k}\sigma} - \frac{\lambda_0}{V} \sum_{\underline{k}\underline{k}'} \hat{c}^{+}_{\underline{k}\uparrow} \hat{c}^{+}_{-\underline{k}\downarrow} \hat{c}_{-\underline{k}'\downarrow} \hat{c}_{\underline{k}'\uparrow} \tag{7.5.1}$$

其中, 要求 $|\varepsilon_{\underline{k}} - \mu| \equiv |\xi_{\underline{k}}| < \omega_{\mathrm{D}}$, 因吸引相互作用仅在该区域内不为零. 式 (7.5.1) 右端的第二项中 λ_0 为正, 且需要体积归一化因子 $1/V$, 因它使得该项线性地随体积 V 增大而不是按体积的平方增大. 尽管这种模型哈密顿相对于更现实的模型 (如计及电子之间的库仑排斥作用等) 显得很简单, 但也能揭示最本质的物理内涵.

定义

$$\hat{A}^{+} = \sum_{\underline{k}} \hat{c}^{+}_{\underline{k}\uparrow} \hat{c}^{+}_{-\underline{k}\downarrow}, \quad \hat{A} = \sum_{\underline{k}} \hat{c}_{-\underline{k}\downarrow} \hat{c}_{\underline{k}\uparrow}, \quad \lambda = \frac{\lambda_0}{V} \tag{7.5.2}$$

则配分函数可写成如下路径积分形式:

$$Z = \int \mathfrak{D}[c^*, c], \mathrm{e}^{-S}$$

其中, 作用量为

$$S = \int_0^{\beta} \mathrm{d}\tau \left[\sum_{\underline{k}\sigma} c^*_{\underline{k}\sigma} \left(\partial_\tau + \varepsilon_{\underline{k}} - \mu\right) c_{\underline{k}\sigma} - \lambda A^* A \right] \tag{7.5.3}$$

显然, 由于含 A^*A 的项是表达成 c^*, c 的 4 次幂的非线性项, 故不能直接进行路径积分运算. 为此我们实施**Stratonovich–Hubbard 变换**, 它实际上是式 (7A.2.45) 的反向运算.

$$\mathrm{e}^{\lambda A^* A} = \int \mathfrak{D}[\Delta^*, \Delta] \mathrm{e}^{-\frac{\Delta^* \Delta}{\lambda} + \Delta^* A + A^* \Delta} \tag{7.5.4}$$

其中, 所引入的辅助场 $\Delta(\tau)$ 仅是时间 τ 的函数. 由此可将配分函数改写成如下形式:

$$Z = \int \mathfrak{D}[\Delta^*, \Delta, c^*, c] \mathrm{e}^{-S} \tag{7.5.5}$$

$$S = \int_0^{\beta} \mathrm{d}\tau \left[\sum_{\underline{k}\sigma} c^*_{\underline{k}\sigma} \left(\partial_\tau + \varepsilon_{\underline{k}} - \mu\right) c_{\underline{k}\sigma} + \Delta^* A + A^* \Delta + \frac{1}{\lambda} \Delta^* \Delta \right] \tag{7.5.6}$$

其中, $\Delta(\tau)$ 满足周期性边界条件 $\Delta(0) = \Delta(\beta)$, 即 Δ 是玻色场变量.

引入**Nambu 旋量**

$$\Psi_{\underline{k}} \equiv \begin{pmatrix} c_{\underline{k}\uparrow} \\ c^*_{-\underline{k}\downarrow} \end{pmatrix} \tag{7.5.7}$$

以及矩阵

$$h_{\underline{k}} \equiv \begin{pmatrix} \varepsilon_{\underline{k}} - \mu & \varDelta \\ \varDelta^* & -\varepsilon_{\underline{k}} + \mu \end{pmatrix} \tag{7.5.8}$$

则作用量可写成

$$S = \int_0^\beta \mathrm{d}\tau \left[\sum_{\underline{k}} \Psi^\dagger_{\underline{k}} \left(\partial_\tau + h_{\underline{k}}\right) \Psi_{\underline{k}} + \frac{1}{\lambda} \varDelta^* \varDelta \right] \tag{7.5.9}$$

现在作用量中费米场是二次型, 因而我们可以在配分函数中积分掉费米自由度而得到

$$Z = \int \mathfrak{D}[\varDelta^*, \varDelta] \mathrm{e}^{-S_{\mathrm{eff}}[\varDelta^*, \varDelta]} \tag{7.5.10}$$

其中, **有效作用量**S_{eff} 满足

$$\mathrm{e}^{-S_{\mathrm{eff}}[\varDelta^*, \varDelta]} = \prod_{\underline{k}} \det\left[\partial_\tau + h_{\underline{k}}\right] \mathrm{e}^{-\int_0^\beta \mathrm{d}\tau \frac{\varDelta^* \varDelta}{\lambda}} \tag{7.5.11}$$

所以

$$S_{\mathrm{eff}} = -\sum_{\underline{k}} \ln\det\left(\partial_\tau + h_{\underline{k}}\right) + \int_0^\beta \mathrm{d}\tau \frac{\varDelta^* \varDelta}{\lambda} \tag{7.5.12}$$

二、平均场论

由于平均场近似方法被广泛地应用, 所以我们分别在算符途径和路径积分途径中讨论这种方法.

(一) 算符途径

在这种途径中, 我们可以构建这种近似下的所谓 “**平均场哈密顿**”. 在平均场近似下, 如下定义的量

$$\eta_{-\underline{k}\downarrow,\underline{k}\uparrow} \equiv \hat{c}_{-\underline{k}\downarrow}\hat{c}_{\underline{k}\uparrow} - \langle \mathrm{BCS}|\hat{c}_{-\underline{k}\downarrow}\hat{c}_{\underline{k}\uparrow}|\mathrm{BCS}\rangle \tag{7.5.13}$$

将被视为小量. 式中, $|\mathrm{BCS}\rangle$ 是理论的基态, 其中有宏观数目的 Cooper 对存在. 注意: $\langle \mathrm{BCS}|\hat{c}_{-\underline{k}\downarrow}\hat{c}_{\underline{k}\uparrow}|\mathrm{BCS}\rangle$ 不为零意味着 $|\mathrm{BCS}\rangle$ 没有固定的粒子数, 这与玻色凝聚中的基态情形类似. 事实上, 双费米子的 Cooper 对态就有玻色特性.

利用式 (7.5.13), 则

$$\hat{c}^+_{\underline{k}\uparrow}\hat{c}^+_{-\underline{k}\downarrow}\hat{c}_{-\underline{k}'\downarrow}\hat{c}_{\underline{k}'\uparrow} \approx \hat{c}^+_{\underline{k}\uparrow}\hat{c}^+_{-\underline{k}\downarrow}\langle \mathrm{BCS}|\hat{c}_{-\underline{k}'\downarrow}\hat{c}_{\underline{k}'\uparrow}|\mathrm{BCS}\rangle$$

$$+ \langle \mathrm{BCS}|\hat{c}^+_{\underline{k}\uparrow}\hat{c}^+_{-\underline{k}\downarrow}|\mathrm{BCS}\rangle \hat{c}_{-\underline{k}'\downarrow}\hat{c}_{\underline{k}'\uparrow}$$
$$- \langle \mathrm{BCS}|\hat{c}^+_{\underline{k}\uparrow}\hat{c}^+_{-\underline{k}\downarrow}|\mathrm{BCS}\rangle \langle \mathrm{BCS}|\hat{c}_{-\underline{k}'\downarrow}\hat{c}_{\underline{k}'\uparrow}|\mathrm{BCS}\rangle \quad (7.5.14)$$

其中, 我们略去了二阶小量 $0(\eta^2)$.

定义

$$\tilde{\Delta}^* \equiv \frac{\lambda_0}{V}\sum_{\underline{k}} \langle \mathrm{BCS}|\hat{c}^+_{\underline{k}\uparrow}\hat{c}^+_{-\underline{k}\downarrow}|\mathrm{BCS}\rangle$$
$$\tilde{\Delta} \equiv \frac{\lambda_0}{V}\sum_{\underline{k}} \langle \mathrm{BCS}|\hat{c}_{-\underline{k}\downarrow}\hat{c}_{\underline{k}\uparrow}|\mathrm{BCS}\rangle \quad (7.5.15)$$

其中, λ_0 为实数. 将式 (7.5.14) 和式 (7.5.15) 代入 BCS 哈密顿 $\hat{H}$(7.5.1) 中, 可得

$$\hat{H} - \mu\hat{N} = \sum_{\underline{k}\sigma} \xi_{\underline{k}}\hat{c}^+_{\underline{k}\sigma}\hat{c}_{\underline{k}\sigma} - \sum_{\underline{k}}\left(\tilde{\Delta}^*\hat{c}_{-\underline{k}\downarrow}\hat{c}_{\underline{k}\uparrow} + \tilde{\Delta}\hat{c}^+_{\underline{k}\uparrow}\hat{c}^+_{-\underline{k}\downarrow}\right) + \frac{V|\tilde{\Delta}|^2}{\lambda_0} \quad (7.5.16)$$

其中, $\xi_{\underline{k}} \equiv \varepsilon_{\underline{k}} - \mu$. 利用**Nambu 旋量**(7.5.7) 对应的算符形式

$$\hat{\Psi}_{\underline{k}} \equiv \begin{pmatrix} \hat{c}_{\underline{k}\uparrow} \\ \hat{c}^+_{-\underline{k}\downarrow} \end{pmatrix} \quad (7.5.17)$$

可将平均场哈密顿写成如下形式:

$$\hat{H} - \mu\hat{N} = \sum_{\underline{k}} \hat{\Psi}^\dagger_{\underline{k}} \begin{pmatrix} \xi_k & -\tilde{\Delta} \\ -\tilde{\Delta}^* & -\xi_{\underline{k}} \end{pmatrix} \Psi_k + \sum_{\underline{k}} \xi_{\underline{k}} + \frac{1}{\lambda}|\tilde{\Delta}|^2 \quad (7.5.18)$$

这种类型的哈密顿常用的对角化方法是将产生和消灭算符作**Bogoliubov 变换**, Bogoliubov 变换是一种**幺正的正则变换**(它能保持算符之间的正则对易关系). 通过这种变换, 我们引入了**准粒子算符:**

$$\begin{pmatrix} \hat{\alpha}_{\underline{k}\uparrow} \\ \hat{\alpha}^+_{-\underline{k}\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta_{\underline{k}} & \sin\theta_{\underline{k}} \\ -\sin\theta_{\underline{k}} & \cos\theta_{\underline{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{c}_{\underline{k}\uparrow} \\ \hat{c}^+_{-\underline{k}\downarrow} \end{pmatrix} \quad (7.5.19)$$

不难验证 $\hat{\alpha}_{\underline{k}\sigma}$, $\hat{\alpha}^+_{\underline{k}\sigma}$ 满足通常的费米子的反对易关系, 例如:

$$[\hat{\alpha}_{\underline{k}\sigma}, \quad \hat{\alpha}_{\underline{k}\sigma}]_+ = 0, \quad [\hat{\alpha}_{\underline{k}\sigma}, \hat{\alpha}^+_{\underline{k}'\sigma'}]_+ = \delta_{\underline{k}\underline{k}'}\delta_{\sigma\sigma'}$$

等. 将式 (7.5.19) 的逆变换代入式 (7.5.18), 就会发现只要 $\theta_{\underline{k}}$ 满足

$$\sin(2\theta_{\underline{k}}) = \frac{\tilde{\Delta}}{E_{\underline{k}}}, \quad \cos(2\theta_{\underline{k}}) = \frac{\xi_{\underline{k}}}{E_{\underline{k}}}, \quad E_{\underline{k}} = \sqrt{\tilde{\Delta}^2 + \xi^2_{\underline{k}}} \quad (7.5.20)$$

就可以使得哈密顿对角化. 注意: 我们已取 $\tilde{\Delta}$ 为实数. 事实上, 若 $\tilde{\Delta}$ 不是实的, 则 $\tilde{\Delta}=|\tilde{\Delta}|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}$, 也总可以通过一个整体规范变换 $\hat{c}\to\hat{c}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi/2}$ 将它变为实的. 对角化哈密顿的形式则为

$$\hat{H}-\mu\hat{N}=\sum_{\underline{k}\sigma}E_{\underline{k}}\hat{\alpha}^{+}_{\underline{k}\sigma}\hat{\alpha}_{\underline{k}\sigma}+\sum_{\underline{k}}(\xi_{\underline{k}}-E_{\underline{k}})+\frac{1}{\lambda}|\tilde{\Delta}|^2 \tag{7.5.21}$$

由此可看出, 准粒子能量为 $E_{\underline{k}}$, 进而由式 (7.5.20) 看出, 元激发需要一最小能量 $\tilde{\Delta}$, $\tilde{\Delta}$ 被称为**能隙**. 正是能隙的存在, 使得在低温下难以激发从而基态表现出所谓的 "**刚度**"(rigidity). 这种有隙的能谱可由图 7.5.1 来说明.

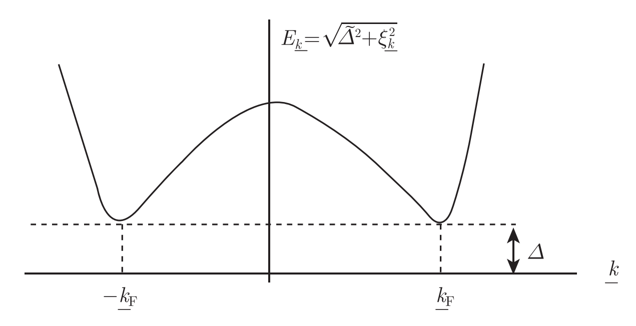


图 7.5.1　准粒子的能量曲线

现在来构建 BCS 基态波函数, 设 $|0\rangle$ 是相对于电子算符 $\left\{\hat{c}^{+}_{\underline{k}},\hat{c}_{\underline{k}}\right\}$ 的真空态, 则相对于准粒子算符 $\left\{\hat{\alpha}^{+}_{\underline{k}},\hat{\alpha}_{\underline{k}}\right\}$ 的基态 $|\mathrm{BCS}\rangle$ 是无任何准粒子的态, 满足

$$\hat{\alpha}_{\underline{k}\sigma}|\mathrm{BCS}\rangle=0\quad(\text{对所有的}\underline{k},\sigma) \tag{7.5.22}$$

这样, $|\mathrm{BCS}\rangle$ 可如下构建出:

$$|\mathrm{BCS}\rangle=\prod_{\underline{k}}\hat{\alpha}_{\underline{k}\uparrow}\hat{\alpha}_{-\underline{k}\downarrow}|0\rangle \tag{7.5.23}$$

很易验证式 (7.5.23) 满足定义 (7.5.22) 的基本要求. 事实上, 因为有 $[\hat{\alpha}_{\underline{k}\sigma},\hat{\alpha}_{\underline{k}\sigma}]_{+}=0$, 所以 $\hat{\alpha}_{\underline{k}\sigma}\hat{\alpha}_{\underline{k}+\sigma}=0$, 故

$$\hat{\alpha}_{\underline{k}\uparrow}|\mathrm{BCS}\rangle=(\hat{\alpha}_{\underline{k}\uparrow}\hat{\alpha}_{\underline{k}\uparrow})\hat{\alpha}_{-\underline{k}\downarrow}\prod_{\underline{k}'\neq\underline{k}}\hat{\alpha}_{\underline{k}'\uparrow}\hat{\alpha}_{-\underline{k}'\downarrow}|0\rangle=0$$

类似也可以证明有 $\hat{\alpha}_{\underline{k}\downarrow}|\mathrm{BCS}\rangle=0$. 将式 (7.5.19) 代入上式, 可将 BCS 基态表达为

$$|\mathrm{BCS}\rangle=\prod_{\underline{k}}\left(\cos\theta_{\underline{k}}-\sin\theta_{\underline{k}}\hat{c}^{+}_{\underline{k}\uparrow}\hat{c}^{+}_{-\underline{k}\downarrow}\right)|0\rangle \tag{7.5.24}$$

利用式 (7.5.22) 及其共轭式, 易知 $\langle \mathrm{BCS}|\mathrm{BCS}\rangle = 1$. 如果不考虑归一化因子, 并注意到 $(\hat{c}^+_{\underline{k}\uparrow}\hat{c}_{-k\downarrow})^2 = 0$, 则可将 $|\mathrm{BCS}\rangle$ 写成相干态形式:

$$|\mathrm{BCS}\rangle \sim \mathrm{e}^{-\hat{b}}|0\rangle \tag{7.5.25}$$

其中

$$\hat{b}^+ = \sum_{\underline{k}} \tan\theta_{\underline{k}} \hat{c}^+_{\underline{k}\uparrow}\hat{c}^+_{-\underline{k}\downarrow} \tag{7.5.26}$$

还需自洽地求解式 (7.5.15) 来确定能隙 $\tilde{\Delta}$:

$$\begin{aligned}\tilde{\Delta} &= \frac{\lambda_0}{V}\sum_{\underline{k}}\langle \mathrm{BCS}|\hat{c}_{-\underline{k}\downarrow}\hat{c}_{\underline{k}\uparrow}|\mathrm{BCS}\rangle = -\frac{\lambda_0}{2V}\sum_{\underline{k}}\sin(2\theta_{\underline{k}}) \\ &= \frac{\lambda_0}{2V}\sum_{\underline{k}}\frac{\tilde{\Delta}}{\sqrt{\tilde{\Delta}^2+\xi^2_{\underline{k}}}} = \frac{\lambda_0}{2}\int_{-\omega_{\mathrm{D}}}^{\omega_{\mathrm{D}}}\mathrm{d}\xi\frac{1}{V}\sum_{\underline{k}}\delta(\xi-\xi_{\underline{k}})\frac{\tilde{\Delta}}{\sqrt{\tilde{\Delta}^2+\xi^2_{\underline{k}}}}\end{aligned}$$

其中, 近似把在费米面附近窄壳中的态密度 $\dfrac{1}{V}\sum\limits_{\underline{k}}\delta(\varepsilon-\varepsilon^{\mu}_{\underline{k}})$ 视为常数 $N(0)$,

则积分得 $\tilde{\Delta} = \lambda_0 N(0)\tilde{\Delta}\mathrm{arsh}\dfrac{\omega_{\mathrm{D}}}{\tilde{\Delta}}$, 故有

$$\tilde{\Delta} = \frac{\omega_{\mathrm{D}}}{\mathrm{sh}(1/\lambda_0 N(0))} \overset{\lambda_0 N(0)\ll 1}{\simeq} 2\omega_{\mathrm{D}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{\lambda_0 N(0)}} \tag{7.5.27}$$

(二) 路径积分途径

在路径积分途径中, 我们的出发点是式 (7.5.12) 中的有效作用量 S_{eff}. 但还必须确定辅助场 $\Delta(\tau)$, 我们将通过**稳相近似**来确定. 在这种近似下, 通过求作用量的驻点 (稳相点) 来建立起 Δ 所满足的**平均场方程**.

由于原来的问题是平移不变的, 所以可使用 Nambu 场的动量–频率本征态:

$$\Psi_{\underline{k}}(\tau) = \frac{1}{\sqrt{\beta}}\sum_n \Psi_{\underline{k}n}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_n\tau}$$

在基底 $\{\Psi_{\underline{k}n}\}$ 中, $\partial_\tau \to -\mathrm{i}\omega_n$. 这样, 式 (7.5.10) 中的行列式就等于

$$\begin{aligned}\det\left[\partial_\tau + h_{\underline{k}}\right] &= \prod_n \det\left[-\mathrm{i}\omega_n + h_{\underline{k}}\right] \\ &= \prod_n\left[\omega_n^2 + \left(\varepsilon_{\underline{k}}-\mu\right)^2 + \Delta^*\Delta\right]\end{aligned}$$

所以**对于均匀场**, 其有效作用量为

$$S_{\mathrm{eff}} = -\sum_{\underline{k}n}\ln\left[\omega_n^2 + \left(\varepsilon_{\underline{k}}-\mu\right)^2 + \Delta^*\Delta\right] + \beta\frac{\Delta^*\Delta}{\lambda}$$

故**平均场方程**为

$$\frac{\partial S_{\rm eff}}{\partial \Delta^*} = -\sum_{\underline{k}n} \frac{\Delta}{\omega_n^2 + \left(\varepsilon_{\underline{k}} - \mu\right)^2 + |\Delta|^2} + \frac{\beta}{\lambda}\Delta = 0 \tag{7.5.28}$$

由此得

$$\frac{1}{\lambda_0} = \frac{1}{\beta V}\sum_{\underline{k}n} \frac{1}{\omega_n^2 + \left(\varepsilon_{\underline{k}} - \mu\right)^2 + |\Delta_0|^2} \tag{7.5.29}$$

它常被称为**BCS 能隙方程**. 因为可以证明由该方程所确定的解 $\Delta_0 = \tilde{\Delta}$. 对于 BCS 模型, 由平均场方程 (或 BCS 能隙方程) 所确定的解 $\Delta = \Delta_0$ 对路径积分的计算基本上是准确的. 首先注意这里的作用量是体积 V 的广延量, 且当 $V \to \infty$ 时, $S_{\rm eff}/V$ 是常数. 这意味着当围绕稳相点 Δ_0 作 $\delta\Delta$ 的小涨落时应满足

$$Z = {\rm e}^{-S_{\rm eff}[\Delta_0^*, \Delta_0] + 0(V)\times[\delta\Delta]^2} \tag{7.5.30}$$

由高斯分布 (或正态分布) 函数知, 绕 Δ_0 的小涨落的方差的量级为 $0(1/V)$, 所以

$$Z = {\rm e}^{-S_{\rm eff}[\Delta_0^*, \Delta_0] + 0(1)} \tag{7.5.31}$$

由此看出平均场近似对于 BCS 超导性的处理是一个好的近似.

现在利用式 (3.2.27) 对能隙方程 (7.5.29) 中的松原频率求和. 因

$$E_{\underline{k}}\left(\xi_{\underline{k}}\right) \equiv \sqrt{\xi_{\underline{k}}^2 + |\Delta_0|^2} \equiv \sqrt{\left(\varepsilon_{\underline{k}} - \mu\right)^2 + |\Delta_0|^2} \tag{7.5.32}$$

注意 $n_{\rm F}(E_{\underline{k}}) - n_{\rm F}(-E_{\underline{k}}) = 2n_{\rm F}(E_{\underline{k}}) - 1 = -{\rm th}\left(\dfrac{\beta E_{\underline{k}}}{2}\right)$, 则可得

$$\frac{1}{\lambda_0} = \frac{1}{V}\sum_{\underline{k}} \frac{1 - 2n_{\rm F}(E_{\underline{k}})}{2E_{\underline{k}}} \tag{7.5.33}$$

故

$$\frac{1}{\lambda_0} = \int_{-\omega_{\rm D}}^{\omega_{\rm D}} {\rm d}\varepsilon \frac{1}{V}\sum_{\underline{k}} \delta(\varepsilon - \xi_{\underline{k}}) \frac{1 - 2n_{\rm F}(E_{\underline{k}}(\varepsilon))}{2E_{\underline{k}}(\varepsilon)}$$

且注意 $E_{\underline{k}}(\varepsilon)$ 是 ε 的偶函数, 这样有

$$\frac{1}{\lambda_0} = N(0)\int_0^{\omega_{\rm D}} {\rm d}\varepsilon \frac{{\rm th}\left(\beta\sqrt{\varepsilon^2 + |\Delta_0|^2}/2\right)}{\sqrt{\varepsilon^2 + |\Delta_0|^2}} \tag{7.5.34}$$

当 $T \ll |\Delta_0|$ 时, 可近似取 ${\rm th}(\beta x) \approx 1$, 则可由上式导出**零温或接近零温时的能隙方程**:

$$\frac{1}{\lambda_0} = N(0)\int_0^{\omega_{\rm D}} {\rm d}\varepsilon \frac{1}{\sqrt{\varepsilon^2 + |\Delta_0|^2}} = N(0){\rm Arsh}\frac{\omega_{\rm D}}{|\Delta_0|}$$

故能隙

$$|\Delta_0| = \omega_{\rm D}/{\rm sh}\frac{1}{\lambda_0 N(0)} \simeq 2\omega_{\rm D}{\rm e}^{-1/[\lambda_0 N(0)]} \tag{7.5.35}$$

上式假设了 $\lambda_0 N(0) \ll 1$, 这与式 (7.5.27) 的结果完全相同, 这也表明平均场方程的解 Δ_0(同样可取为实数) 即能隙.

为了计算**临界温度**(或**转变温度**)$T_{\rm C}$, 我们考虑能隙方程 (7.5.29)

$$\begin{aligned}\frac{1}{\lambda_0} &= \frac{1}{\beta}\sum_n \int_{-\infty}^{\infty} {\rm d}\varepsilon \frac{1}{V}\sum_{\underline{k}} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\underline{k}}^{\mu})\frac{1}{\omega_n^2 + \varepsilon^2 + |\Delta_0|^2} \\ &= \frac{N(0)}{\beta}\sum_n \int_{-\infty}^{\infty} {\rm d}\varepsilon \frac{1}{\omega_n^2 + \varepsilon^2 + |\Delta_0|^2} \\ &= \frac{\pi N(0)}{\beta}\sum_n \frac{1}{\sqrt{\omega_n^2 + |\Delta_0|^2}}\end{aligned} \tag{7.5.36}$$

式中, 我们已把对能量的积分区域扩展到无穷大. 因为刚低于临界温度, 能隙就会变成无穷小, 故有

$$\Delta_0(T_{\rm C}^-) = 0 \tag{7.5.37}$$

把它代入式 (7.5.36) 得

$$\frac{1}{\lambda_0} = \frac{\pi N(0)}{\beta}\sum_n \frac{1}{|\omega_n|}\bigg|_{T=T_{\rm C}}$$

其中, $|\omega_n| < \omega_{\rm D}$.

又由于

$$\sum_{|\omega_n|<\omega_{\rm D}} \frac{1}{|\omega_n|} = 2\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{1}{\omega_n} - \frac{1}{\omega_n + \omega_{\rm D}}\right)$$

故

$$\frac{1}{\lambda_0} = N(0)\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{1}{n+\frac{1}{2}} - \frac{1}{n+\frac{1}{2}+\frac{\omega_{\rm D}}{2\pi T_{\rm C}}}\right) \tag{7.5.38}$$

利用普西函数 (或双伽马函数):

$$\psi(z) \equiv \frac{\rm d}{{\rm d}z}\ln\Gamma(z) = -C - \sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{1}{n+z} - \frac{1}{n+1}\right) \tag{7.5.39}$$

其中, $C = 0.577$ 是欧拉常数. 注意到对于大的 $|z|$, $\psi(z) \approx \ln z$(参见数学手册编写组. 数学手册. 北京: 高等教育出版社, 1977), 则

$$\frac{1}{\lambda_0 N(0)} = \psi\left(\frac{1}{2} + \frac{\omega_{\rm D}}{2\pi T_{\rm C}}\right) - \psi\left(\frac{1}{2}\right) = \ln\left(\frac{\omega_{\rm D}{\rm e}^{-\psi\left(\frac{1}{2}\right)}}{2\pi T_{\rm C}}\right)$$

临界温度满足

$$T_{\mathrm{C}}=\frac{\mathrm{e}^{-\psi\left(\frac{1}{2}\right)}}{2\pi}\omega_{\mathrm{D}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{\lambda_0 N(0)}}\approx 1.13\omega_{\mathrm{D}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{\lambda_0 N(0)}} \tag{7.5.40}$$

尽管式 (7.5.35) 和式 (7.5.40) 的推导中, 我们都引入了截断, 但这种截断会在能隙与临界温度的 2 倍比值中相消, 使得这种比值对于常规超导体是一个被实验证实了的普适量.

$$\frac{2\Delta_0}{T_{\mathrm{C}}}=8\pi\mathrm{e}^{\psi\left(\frac{1}{2}\right)}\approx 3.53 \tag{7.5.41}$$

当 $T<T_{\mathrm{C}}$ 时, 体系处于由反常配对基态所表征的低温相; 当 $T>T_{\mathrm{C}}$ 时, 体系处于类似费米液体的高温相, 其中自由准粒子激发占优.

三、Gorkov 格林函数

为了减少过多的代数运算, 我们将在式 (7.5.7) 中引入的 Nambu 表象中引入矩阵格林函数, 它通常称为 Gorkov 格林函数:

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{g}(\underline{k},\tau)&\equiv-\langle\Psi_{\underline{k}}(\tau)\Psi_{\underline{k}}^{+}(0)\rangle\\
&=-\left\langle\begin{pmatrix}c_{\underline{k}\uparrow}(\tau)\\ c_{-\underline{k}\downarrow}^{*}(\tau)\end{pmatrix}\left(c_{\underline{k}\uparrow}^{*}(0),c_{-\underline{k}\downarrow}(0)\right)\right\rangle\\
&=-\begin{pmatrix}\langle c_{\underline{k}\uparrow}(\tau)c_{\underline{k}\uparrow}^{*}(0)\rangle & \langle c_{\underline{k}\uparrow}(\tau)c_{-\underline{k}\downarrow}(0)\rangle\\ \langle c_{-\underline{k}\downarrow}^{*}(\tau)c_{\underline{k}\uparrow}^{*}(0)\rangle & \langle c_{-\underline{k}\downarrow}^{*}(\tau)c_{-\underline{k}\downarrow}(0)\rangle\end{pmatrix}\\
&\equiv\begin{pmatrix}g^{\uparrow}(\underline{k},\tau) & F(\underline{k},\tau)\\ \bar{F}(\underline{k},\tau) & g^{\downarrow}(\underline{k},\tau)\end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{7.5.42}$$

其中

$$F(\underline{k},\tau)\equiv-\langle c_{\underline{k}\uparrow}(\tau)c_{-\underline{k}\downarrow}(0)\rangle,\quad \bar{F}(\underline{k},\tau)\equiv-\langle c_{-\underline{k}\downarrow}^{*}(\tau)c_{\underline{k}\uparrow}^{*}(0)\rangle \tag{7.5.43}$$

称为**反常格林函数**, 它源于所谓的 Andreev 反射, 在这类散射中, 电子和有相同动量及自旋的空穴之间相互转变.

类似于式 (7.3.39) 的导出, 不难由式 (7.5.9) 得出

$$\boldsymbol{g}(\underline{k},\mathrm{i}\omega_n)=\int_0^{\beta}\mathrm{d}\tau\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n\tau}\boldsymbol{g}(\underline{k},\tau)=\frac{1}{\mathrm{i}\omega_n-h_{\underline{k}}} \tag{7.5.44}$$

其中 (参见式 (7.5.8))

$$\mathrm{i}\omega_n-h_{\underline{k}}=\begin{pmatrix}\mathrm{i}\omega_n-\xi_{\underline{k}} & -\Delta\\ -\Delta^{*} & \mathrm{i}\omega_n+\xi_{\underline{k}}\end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{g}(\underline{k},\mathrm{i}\omega_n)=\left(\mathrm{i}\omega_n-h_{\underline{k}}\right)^{-1}$$

$$= \frac{1}{(\mathrm{i}\omega_n)^2 - E_{\underline{k}}^2} \begin{pmatrix} \mathrm{i}\omega_n + \xi_{\underline{k}} & \varDelta \\ \varDelta^* & \mathrm{i}\omega_n - \xi_{\underline{k}} \end{pmatrix} \tag{7.5.45}$$

$$E_{\underline{k}}^2 = \xi_{\underline{k}}^2 + |\varDelta|^2$$

而无相互作用格林函数 $\boldsymbol{g}_0(\underline{k}, \mathrm{i}\omega_n)$(取 $\varDelta$ 为零时) 是

$$\boldsymbol{g}_0(\underline{k}, \mathrm{i}\omega_n) = \begin{pmatrix} g_0^{\uparrow}(\underline{k}, \mathrm{i}\omega_n) & 0 \\ 0 & g_0^{\downarrow}(\underline{k}, \mathrm{i}\omega_n) \end{pmatrix} \tag{7.5.46}$$

其中

$$g_0^{\uparrow}(\underline{k}, \mathrm{i}\omega_n) = \frac{1}{\mathrm{i}\omega_n - \xi_{\underline{k}}}, \quad g_0^{\downarrow}(\underline{k}, \mathrm{i}\omega_n) = \frac{1}{\mathrm{i}\omega_n + \xi_{\underline{k}}}$$

令 $k \equiv (\underline{k}, \mathrm{i}\omega_n)$, 可以用费曼图分别将上述格林函数表示为

k　$g_0^{\uparrow}(k)$

$-k$　$g_0^{\downarrow}(k)$

根据相互作用哈密顿式 (7.5.16) 可知, 有如下两点顶角:

k　$-k$　$\varDelta^*$

$-k$　k　$\varDelta$

显然, 对于正常的完全格林函数, 有

$g^{\uparrow}(\underline{k}, \mathrm{i}\omega_n) =$ (k)

$=$ (k) $+$ (k, $-k$, k)

$+$ (k, $-k$, k, $-k$, k)

$+ \cdots$

观察到上图的结构可以表达成

$g^{\uparrow}(\underline{k}, \mathrm{i}\omega_n) =$ — $+$ ($\varSigma$)

$+$ ($\varSigma$) ($\varSigma$)

$+ \cdots$

其中

$$\Sigma = -k$$

所以

$$\Sigma(k) = \frac{|\Delta|^2}{\mathrm{i}\omega_n + \xi_{\underline{k}}} \tag{7.5.47}$$

将式 (7.5.47) 代入式 (7.5.46) 中, 得

$$\begin{aligned} g^{\uparrow}(\underline{k}, \mathrm{i}\omega_n) &= \frac{g_0^{\uparrow}(k)}{1 - \Sigma(k) g_0^{\uparrow}(k)} = \frac{1}{\mathrm{i}\omega_n - \xi_{\underline{k}} - \Sigma(k)} \\ &= \frac{\mathrm{i}\omega_n + \xi_{\underline{k}}}{(\mathrm{i}\omega_n)^2 - E_{\underline{k}}^2} \end{aligned} \tag{7.5.48}$$

这与式 (7.5.44) 的结果一致. 我们也可以类似地用费曼图技术来验证式 (7.5.44) 所给出的反常完全格林函数 $F(\underline{k}, \mathrm{i}\omega_n)$:

$F(\underline{k}, \mathrm{i}\omega_n) =$

$= \; -k \quad k \; + \; -k \quad k \quad -k \quad k \; + \cdots$

$= \; -k \quad k$

故

$$F(\underline{k}, \mathrm{i}\omega_n) = \frac{1}{\mathrm{i}\omega_n + \xi_{\underline{k}}} \Delta \frac{1}{\mathrm{i}\omega_n - \xi_{\underline{k}} - \Sigma(k)} = \frac{\Delta}{(\mathrm{i}\omega_n)^2 - E_{\underline{k}}^2} \tag{7.5.49}$$

附录 7A　泛 函 积 分

7A.1　(经典) 对易场的泛函积分

⟨1⟩ 可以将对易场的泛函积分

$$G[F] = \int [\mathrm{d}\varphi] F[\varphi(x)] \tag{7A.1.1}$$

看成多元函数多重积分的极限:

$$G = \lim_{n \to \infty} \int \mathrm{d}\varphi_1 \mathrm{d}\varphi_2 \cdots \mathrm{d}\varphi_n F(\varphi_1, \varphi_2, \cdots, \varphi_n) \tag{7A.1.2}$$

如果上式的极限存在.

另一种理解式 (1A.1.1) 及式 (7A.1.2) 的较为方便的方法, 是借助于一个完全的正交归一的函数集 $\{u_i(x)\}$, 把场量 $\varphi(x)$ 分解成正规模:

$$\varphi(x)=\sum_i \varphi_i u_i(x) \tag{7A.1.3}$$

然后把系数集 φ_i 作为独立变量. 若起初只取上述展开的前 n 项, 则可得到 n 元普通函数 $F(\varphi_1,\varphi_2,\cdots,\varphi_n)$, 然后泛函 F 及泛函积分 G 可分别作为极限 $n\to\infty$ 而从式 (7A.1.1) 及式 (7A.1.2) 得出.

在一般情形下, 变量的无限增多, 会导致积分 (7A.1.2) 发散. 在实际的物理问题中, 可以通过对每一积分变量引进一个权重因子或对所有变量引进联合权重函数来补救. 所引进的权重函数构成了**积分测度**. 设

$$\prod_{j=1}^{n}\mathrm{d}\varphi_j\mu(\varphi_1,\varphi_2,\cdots,\varphi_n) \tag{7A.1.4}$$

为一测度序列, 由它定义的多重积分序列为

$$\int\prod_{j=1}^{n}\mathrm{d}\varphi_j\mu(\varphi_1,\varphi_2,\cdots,\varphi_n)F(\varphi_1,\varphi_2,\cdots,\varphi_n) \tag{7A.1.5}$$

当 $n\to\infty$ 时, 序列 (7A.1.5) 的极限若存在, 则将此极限称为**泛函积分**, 记为

$$\begin{aligned}G[F]&=\lim_{n\to\infty}\int\prod_{j=1}^{n}\mathrm{d}\varphi_j\mu(\varphi_1,\varphi_2,\cdots,\varphi_n)F(\varphi_1,\varphi_2,\cdots,\varphi_n)\\&=\int[\mathrm{d}\varphi]\mu[\varphi]F[\varphi]\end{aligned} \tag{7A.1.6}$$

上式表示的泛函积分本身也是一个泛函. 当 $\mu[\varphi]$ 为一概率密度时, $G[F]$ 就是泛函 $F[\varphi]$ 的平均值.

泛函积分测度 $[\mathrm{d}\varphi]\mu[\varphi]$ 通常由具体的物理问题来确定, 最常见的有如下形式:

$$[\mathrm{d}\varphi]\mathrm{e}^{-\varphi A\varphi} \tag{7A.1.7}$$

这是一个含有二次型的指数衰减因子的**万尼尔测度**. 万尼尔曾证明, 对于相当普遍的一类泛函 $F[\varphi]$, 例如, 一切有界泛函或一切连续泛函, 积分 (7A.1.6) 对于式 (7A.1.7) 的测度是存在的. 至于函数 φ 所属的函数类, 只要处处连续和可微即可.

⟨2⟩ 下面讨论一类重要的泛函积分: 高斯泛函积分. 为此我们先看普通的高斯积分

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}x}{\sqrt{\pi}}\mathrm{e}^{-ax^2}=\frac{1}{\sqrt{a}}\quad(\mathrm{Re}a>0) \tag{7A.1.8}$$

以及菲涅耳积分

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}x}{\sqrt{\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}ax^2}=\sqrt{\frac{\mathrm{i}}{a}}\quad(\mathrm{Im}a\geqslant 0)\tag{7A.1.9}$$

可以将式 (7A.1.8) 及式 (7A.1.9) 统一为

$$G(a)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}x}{\sqrt{\pi}}\mathrm{e}^{-ax^2}=\frac{1}{\sqrt{a}}\quad(a\neq 0,\mathrm{Re}a\geqslant 0)\tag{7A.1.10}$$

$G(a)$ 的多维推广为

$$G(A)=\int_{-\infty}^{\infty}\prod_{j=1}^{n}\frac{\mathrm{d}x_j}{\sqrt{\pi}}\mathrm{e}^{-\sum\limits_{k,l}x_kA_{kl}x_l}=\int_{-\infty}^{\infty}\prod_{j=1}^{n}\frac{\mathrm{d}x_j}{\sqrt{\pi}}\mathrm{e}^{-X^{\mathrm{T}}AX}\tag{7A.1.11}$$

其中, $X^{\mathrm{T}}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)$ 是列矩阵 X 的转置矩阵; A 是 $n\times n$ 的对称矩阵, 其元素为 A_{kl}. 根据线性代数的理论可知, 对称矩阵可以对角化, 即存在一个正交矩阵 R:

$$R^{\mathrm{T}}R=RR^{\mathrm{T}}=1\tag{7A.1.12}$$

使得

$$A=R^{\mathrm{T}}DR\tag{7A.1.13}$$

其中, D 为对角矩阵, 设

$$D=\mathrm{diag}(d_1,d_2,\cdots,d_n)\tag{7A.1.14}$$

显然 $d_1,d_2,\cdots,d_n$ 为 A 的本征值. 令

$$Y=RX\tag{7A.1.15}$$

则有

$$G(A)=\int_{-\infty}^{\infty}\prod_{j=1}^{n}\frac{\mathrm{d}y_j}{\sqrt{\pi}}\mathrm{e}^{-Y^{\mathrm{T}}DY}\tag{7A.1.16}$$

这里利用了雅可比行列式等于 1 的事实. 由于 D 是对角的, 故 $G(A)$ 分离为 n 重乘积:

$$G(A)=G(d_1)G(d_2)\cdots G(d_n)=(d_1d_2\cdots d_n)^{-1/2}=(\det A)^{-1/2}\tag{7A.1.17}$$

条件是, A 的所有本征值不为零, 且本征值的实部是非负的:

$$\mathrm{Re}d_i\geqslant 0\quad(d_i\neq 0)\tag{7A.1.18}$$

现在在式 (7A.1.11) 中取 $x_j=\varphi_j$, 并让 $n\to\infty$, 求极限后, 得**高斯泛函积分**:

$$\int\frac{\mathrm{d}\varphi}{\sqrt{\pi}}\mathrm{e}^{-\int\mathrm{d}x\mathrm{d}y\varphi(x)A(x,y)\varphi(y)}=(\det A)^{-1/2}\tag{7A.1.19}$$

只要算符 A 满足式 (7A.1.18) 的条件. 当然这里涉及的是无穷维矩阵和**无穷维 Fredholm 行列式**.

进一步, 考虑积分

$$G(A,J)=\int_{-\infty}^{\infty}\prod_{j=1}^{n}\frac{\mathrm{d}x_j}{\sqrt{\pi}}\mathrm{e}^{-X^{\mathrm{T}}AX+J^{\mathrm{T}}X} \tag{7A.1.20}$$

其中, $J^{\mathrm{T}}=(J_1,J_2,\cdots,J_n)$. 因为只要 A^{-1} 存在, 则有

$$X^{\mathrm{T}}AX-J^{\mathrm{T}}X=\left(X-\frac{1}{2}A^{-1}J\right)^{\mathrm{T}}A\left(X-\frac{1}{2}A^{-1}J\right)-\frac{1}{4}J^{\mathrm{T}}A^{-1}J$$

现令 $X'=X-\dfrac{1}{2}A^{-1}J$, 从而 $\mathrm{d}x'_j=\mathrm{d}x_j$, 故

$$G(A,J)=\mathrm{e}^{J^{\mathrm{T}}A^{-1}J/4}\int_{-\infty}^{\infty}\prod_{j=1}^{n}\frac{\mathrm{d}x'_j}{\sqrt{\pi}}\mathrm{e}^{-X'^{\mathrm{T}}AX'}=\mathrm{e}^{J^{\mathrm{T}}A^{-1}J/4}(\det A)^{-1/2} \tag{7A.1.21}$$

过渡到泛函积分为

$$\int\left[\frac{\mathrm{d}\varphi}{\sqrt{\pi}}\right]\mathrm{e}^{-\int\mathrm{d}x\mathrm{d}y\varphi(x)A(x,y)\varphi(y)+\int\mathrm{d}xJ(x)\varphi(y)}=N\mathrm{e}^{\frac{1}{4}\int\mathrm{d}x\mathrm{d}yJ(x)A^{-1}J(y)} \tag{7A.1.22}$$

其中, 归一化因子 $N=(\det A)^{-1/2}$, 而 A^{-1} 为 A 的逆算符.

显然上述符号冗长, 可以简化记号. 为此我们采用**广义爱因斯坦规约**, 即除了对重复出现的离散指标自动求和之外, 还对重复出现的连续指标 (包括坐标 x) 自动求积分. 这样积分 $\int\mathrm{d}xJ(x)\varphi(x)$ 可简记为 $J_x\varphi_x$, 或记为广义矩阵符号 $J\cdot\varphi$ 等, 甚至就记为 $J(x)\varphi(x)$. 根据这一约定, 式 (7A.1.19) 和式 (7A.1.22) 简记为

$$\int\mathfrak{D}\varphi\mathrm{e}^{-\varphi_xA_{xy}\varphi_y}=(\det A)^{-1/2}\equiv N \tag{7A.1.23}$$

$$\int\mathfrak{D}\varphi\mathrm{e}^{-\varphi_xA_{xy}\varphi_y+J_x\varphi_x}=N\mathrm{e}^{J_xA^{-1}_{xy}J_y} \tag{7A.1.24}$$

其中, $\mathfrak{D}\varphi=\left[\dfrac{\mathrm{d}\varphi}{\sqrt{\pi}}\right]$. 以后运用式 (7A.1.24) 时, 也可将 $\mathfrak{D}\varphi$ 中的常数因子吸引进因子 N 中 (这个因子也许是无穷大), 而将 $\mathfrak{D}\varphi$ 理解成 $[\mathrm{d}\varphi]$. **上面公式中要求 A 是对称矩阵, 其本征值均不为零, 且本征值的实部是非负的**.

7A.2　泛函积分变换

⟨1⟩ 在泛函积分下作变换, 常可以得到我们所需要的公式形式, 也可获得一些新的有用的公式. 例如, 作变换: $\varphi\to\dfrac{1}{\sqrt{2}}\varphi$, $J\to\sqrt{2}J$, 则式 (7A.1.23) 及式 (7A.1.24) 分别成为

$$\int\mathfrak{D}\varphi\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\varphi_xA_{xy}\varphi_y}=(\det A)^{-1/2}\equiv N \tag{7A.2.1}$$

$$\int \mathfrak{D}\varphi \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\varphi_x A_{xy}\varphi_y + J_x\varphi_x} = N\mathrm{e}^{\frac{1}{2}J_x A_{xy}^{-1} J_y} \tag{7A.2.2}$$

其中, $\mathfrak{D}\varphi \equiv \left[\dfrac{\mathrm{d}\varphi}{\sqrt{2\pi}}\right]$.

以式 (7A.2.2) 为出发点, 首先定义场量乘积的有高斯权重的泛函平均:

$$\langle\varphi(x_1)\varphi(x_2)\cdots\varphi(x_n)\rangle_{\mathrm{G}} \equiv \frac{\int \mathfrak{D}\varphi\varphi(x_1)\varphi(x_2)\cdots\varphi(x_n)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\varphi\cdot A\cdot\varphi}}{\int \mathfrak{D}\varphi \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\varphi\cdot A\cdot\varphi}} \tag{7A.2.3}$$

利用式 (7A.2.2), 很易看出

$$\langle\varphi(x_1)\varphi(x_2)\cdots\varphi(x_n)\rangle_{\mathrm{G}} = \frac{\delta}{\delta J(x_1)}\frac{\delta}{\delta J(x_2)}\cdots\frac{\delta}{\delta J(x_n)}\mathrm{e}^{\frac{1}{2}J\cdot A^{-1}\cdot J}|_{J=0} \tag{7A.2.4}$$

进一步, 由上式可得出**Wick 定理**:

$$\left\langle\prod_{i=1}^{2s}\varphi(x_i)\right\rangle_{\mathrm{G}} = \sum_{\substack{\{1,2,\cdots,2s\}\\ \text{的所有可能的对}}} A^{-1}(x_{i_1},x_{i_2})A^{-1}(x_{i_2},x_{i_3})\cdots A^{-1}(x_{i_{2s-1}},x_{i_{2s}}) \tag{7A.2.5}$$

例如:

$$\begin{aligned}\langle\varphi(x_1)\varphi(x_2)\varphi(x_3)\varphi(x_4)\rangle_{\mathrm{G}} =& A^{-1}(x_1,x_2)A^{-1}(x_3,x_4)\\ &+ A^{-1}(x_1,x_3)A^{-1}(x_2,x_4)\\ &+ A^{-1}(x_1,x_4)A^{-1}(x_2,x_3)\end{aligned} \tag{7A.2.6}$$

上述关于有高斯权重的泛函平均的定义显然可推广到解析泛函 $F[\varphi]$ 的情形:

$$\langle F[\varphi]\rangle_{\mathrm{G}} \equiv N^{-1}\int \mathfrak{D}\varphi F[\varphi]\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\varphi\cdot A\cdot\varphi} = F\left[\frac{\delta}{\delta J}\right]\mathrm{e}^{\frac{1}{2}J\cdot A^{-1}\cdot J}|_{J=0} \tag{7A.2.7}$$

这只需要注意到

$$\int \mathfrak{D}\varphi F[\varphi]\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\varphi\cdot A\cdot\varphi + J\cdot\varphi} = F\left[\frac{\delta}{\delta J}\right]\int \mathfrak{D}\varphi \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\varphi\cdot A\cdot\varphi + J\cdot\varphi} \tag{7A.2.8}$$

就知式 (7A.2.7) 的正确性.

⟨2⟩ 常见的泛函积分的变换有以下几种.

(1) 分布积分.

只要 $\|\varphi(x)\| \to \infty$ 时 (这里 $\|\varphi(x)\|$ 可以简单地定义为最大值 $\max(|\varphi(x)|)$), 泛函 $\|F[\varphi]\|$ 足够快地趋于零, 那么如同全微分的积分为零一样, 全泛函导数的泛函积分也是零:

$$\int \mathfrak{D}\varphi \frac{\delta F[\varphi]}{\delta\varphi(z)} = 0 \tag{7A.2.9}$$

令 $F=F_1\cdot F_2$, 则得分部积分公式:

$$\int \mathfrak{D}\varphi F_1[\varphi]\frac{\delta F_2[\varphi]}{\delta\varphi(z)}=-\int \mathfrak{D}\varphi\frac{\delta F_1[\varphi]}{\delta\varphi(z)}F_2[\varphi] \tag{7A.2.10}$$

(2) 函数平移.

令

$$\varphi=\psi+c(x) \tag{7A.2.11}$$

其中, $c(x)$ 是某个固定的连续函数, 则泛函积分的值在此变换下不变. 有

$$\int \mathfrak{D}\varphi F[\varphi]\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\varphi\cdot A\cdot\varphi}=\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}C\cdot A\cdot C}\int \mathfrak{D}\psi F[\psi+c]\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\psi\cdot A\cdot\psi-\frac{1}{2}C\cdot A\cdot\psi-\frac{1}{2}\psi\cdot A\cdot C} \tag{7A.2.12}$$

(3) δ 泛函和泛函傅里叶变换.

类比通常的狄拉克 δ 函数的积分表示, 可以定义δ **泛函**:

$$\delta[\varphi-\psi]\equiv\int \mathfrak{D}J\mathrm{e}^{(\varphi-\psi)\cdot J} \tag{7A.2.13}$$

但与通常情形相比, **这里略去了指数上的因子**i, 这点是不重要的, 因为对 J 的泛函积分的路径与下面的代数考虑无关. (同样的道理也使我们可略去任何归一化因子 (它吸收进 $\mathfrak{D}J$ 中), 即 $\mathfrak{D}J$ 的具体表述形式无关紧要.) 只要需要, 我们可补上这些被略去的部分.

δ 泛函的性质是

$$\int \mathfrak{D}\varphi F[\varphi]\delta(\varphi-\psi)=F[\psi] \tag{7A.2.14}$$

泛函傅里叶变换可定义为

$$F[\varphi]=\int \mathfrak{D}J\tilde{F}[J]\mathrm{e}^{-J\cdot\varphi} \tag{7A.2.15}$$

其逆变换为

$$\tilde{F}[J]=\int \mathfrak{D}\varphi F[\varphi]\mathrm{e}^{J\cdot\varphi} \tag{7A.2.16}$$

只要需要, 我们可以在指数上补上因子 i, 可以看出, 式 (7A.2.15) 及式 (7A.2.16) 可视为傅里叶变换式.

(4) 无穷小变量变换.

令

$$\varphi(x)=\psi(x)+\varepsilon G[x,\psi(x)] \tag{7A.2.17}$$

其中, ε 为无穷小量; G 是 ψ 的泛函.

$$G[x,\psi(x)]=\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}\int \mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\cdots\mathrm{d}x_n\psi(x_1)\psi(x_2)\cdots\psi(x_n)G^{(n)}(x;x_1,x_2,\cdots,x_n) \tag{7A.2.18}$$

变换式 (7A.2.17) 所引起的测度的雅可比行列式为

$$\det\frac{\delta\varphi(x)}{\delta\psi(y)}=\det\left\{\delta(x-y)+\varepsilon\frac{\delta G[x,\psi]}{\delta\psi(y)}\right\}=1+\varepsilon\frac{\delta G[x,\psi]}{\delta\psi(x)} \tag{7A.2.19}$$

这里我们利用了**恒等式**

$$\det(1+\varepsilon A)=1+\varepsilon\cdot\mathrm{tr}A+0(\varepsilon^2) \tag{7A.2.20}$$

同时, 式 (7A.2.19) 的结果中还包含了对 x 的自动求积分.

现对泛函积分

$$Z[J]=\int\mathfrak{D}\varphi\mathrm{e}^{-S[\varphi]+J\cdot\varphi} \tag{7A.2.21}$$

作代换 (7A.2.17), 假设泛函积分 (7A.2.21) 之值在此变换下不变 (参见下面的例子). 由于

$$\begin{cases}S[\varphi]=S[\psi]+\varepsilon\dfrac{\delta S}{\delta\psi(x)}G[x,\psi]\\[2ex]\mathfrak{D}\varphi=\mathfrak{D}\psi\left(1+\varepsilon\dfrac{\delta G[x,\psi]}{\delta\psi(x)}\right)\\[2ex]J\cdot\varphi=J\cdot\psi+\varepsilon J\cdot G\end{cases} \tag{7A.2.22}$$

故

$$Z[J]=\int\mathfrak{D}\psi\left(1+\varepsilon\frac{\delta G[x,\psi]}{\delta\psi(x)}\right)\left\{1-\varepsilon\frac{\delta S}{\delta\psi(x)}G[x,\psi]+\varepsilon J\cdot G\right\}\mathrm{e}^{-S[\psi]+J\cdot\psi}+0(\varepsilon^2) \tag{7A.2.23}$$

考虑 ε 的一次项, 有下列恒等式:

$$\left\{J(x)G\left[x,\frac{\delta}{\delta J}\right]-G\left[x,\frac{\delta}{\delta J}\right]\frac{\delta S}{\delta\psi(x)}\left[\frac{\delta}{\delta J}\right]+\frac{\delta G}{\delta\psi(x)}\left[x,\frac{\delta}{\delta J}\right]\right\}Z[J]=0 \tag{7A.2.24}$$

当无穷小变量变换是规范变换时, 由上式就可得出**Ward 恒等式**.

例　就泛函积分存在的情形 (如高斯泛函积分), 验明式 (7A.2.21) 的值在无穷小变量变换 (7A.2.17) 下不变.

解　在式 (1A.4.17) 的变换下, 有

$$Z[J]=\int\mathfrak{D}\psi\det\frac{\delta\varphi}{\delta\psi}\mathrm{e}^{-S[\psi+\varepsilon G]+J\cdot(\psi+\varepsilon G)} \tag{7A.2.25}$$

现在只需验证式 (7A.2.21) 和式 (7A.2.25) 的傅里叶变换相等就足够了. 事实上, 由式 (7A.2.15) 知, 式 (7A.2.21) 的傅里叶变换显然为

$$\tilde{Z}[\tilde{\varphi}]=\int\mathfrak{D}JZ[J]\mathrm{e}^{-J\cdot\tilde{\varphi}}=\mathrm{e}^{-S[\tilde{\varphi}]}$$

而式 (7A.2.25) 的傅里叶变换为

$$\int \mathfrak{D}\psi \det \frac{\delta\varphi}{\delta\psi} \mathrm{e}^{-S[\varphi]} \delta[\phi - \tilde{\varphi}] = \mathrm{e}^{-S[\tilde{\varphi}]} \tag{7A.2.26}$$

注意: 上述的验证中没有利用无穷小变换的性质, 因而也适用于非无穷小的变量变换的情形.

⟨3⟩ 在式 (7A.2.26) 中我们运用了 δ 泛函的一个有用的恒等式:

$$\int \mathfrak{D}\psi \det \frac{\delta\varphi}{\delta\psi} F[\psi] \delta[\varphi[\psi]] = F[\psi(\varphi = 0)] \tag{7A.2.27}$$

它可从 $\int \mathfrak{D}\varphi F[\psi(\varphi)] \delta[\varphi] = F[\psi(\varphi = 0)]$ 这一等式的右端作变量变换 $\varphi = \varphi(\psi) \to \psi$ 而得出.

⟨4⟩ 二次型的选择.

泛函积分 (7A.2.2) 中, 可将二次部分的核 A 分解成二项之和:

$$A = A_1 + A_2 \tag{7A.2.28}$$

其中, A_1 是对称的和正的, 则

$$Z_0[J] \equiv \int \mathfrak{D}\varphi \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\varphi \cdot A \cdot \varphi + J \cdot \varphi} = \int \mathfrak{D}\varphi \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\varphi \cdot (A_1 + A_2) \cdot \varphi + J \cdot \varphi} = N \mathrm{e}^{\frac{1}{2} J \cdot (A_1 + A_2)^{-1} \cdot J} \tag{7A.2.29}$$

可直接证明

$$Z_0[J] = N \mathrm{e}^{-\frac{1}{2} \frac{\delta}{\delta J} A_2 \frac{\delta}{\delta J}} \mathrm{e}^{\frac{1}{2} J \cdot A_1^{-1} \cdot J} \tag{7A.2.30}$$

这等价于关系式

$$\mathrm{e}^{-\frac{1}{2} \frac{\delta}{\delta J} A_2 \frac{\delta}{\delta J}} \mathrm{e}^{\frac{1}{2} J \cdot A_1^{-1} \cdot J} = \mathrm{e}^{\frac{1}{2} J \cdot (A_1 + A_2)^{-1} \cdot J} \tag{7A.2.31}$$

证明　先计算如下的量:

$$A_1(x, y) \frac{\delta}{\delta J(y)} \mathrm{e}^{-\frac{1}{2} \frac{\delta}{\delta J} A_2 \frac{\delta}{\delta J}} \mathrm{e}^{\frac{1}{2} J \cdot A_1^{-1} \cdot J} = \mathrm{e}^{-\frac{1}{2} \frac{\delta}{\delta J} A_2 \frac{\delta}{\delta J}} J(x) \mathrm{e}^{\frac{1}{2} J \cdot A_1^{-1} \cdot J} \tag{7A.2.32}$$

其中, 利用了

$$A_1(x, y) A_1^{-1}(y, z) = \delta(x - z) \tag{7A.2.33}$$

我们将式 (7A.2.23) 右端的 $J(x)$ 移到指数式的左端. 注意到对任意两算符 B、C, 当 $[[B, C], B] = [[B, C], C] = 0$ 时, 则有

$$[\mathrm{e}^B, C] = [B, C] \mathrm{e}^B \tag{7A.2.34}$$

又由于

$$\left[\frac{\delta}{\delta J(y)}, J(x)\right] = \delta(x-y) \tag{7A.2.35}$$

我们可将式 (7A.2.34) 应用于下面的对易关系, 得

$$\begin{aligned}\left[\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\frac{\delta}{\delta J}A_2\frac{\delta}{\delta J}}, J(x)\right] &= \left[-\frac{1}{2}\frac{\delta}{\delta J}A_2\frac{\delta}{\delta J}, J(x)\right]\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\frac{\delta}{\delta J}A_2\frac{\delta}{\delta J}} \\ &= \left\{-\frac{1}{2}\frac{\delta}{\delta J}\left[A_2\cdot\frac{\delta}{\delta J}, J(x)\right] + \left[-\frac{1}{2}\frac{\delta}{\delta J}, J(x)\right]\cdot A_2\cdot\frac{\delta}{\delta J}\right\}\cdot\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\frac{\delta}{\delta J}A_2\frac{\delta}{\delta J}} \\ &= \left(A_2\cdot\frac{\delta}{\delta J}\right)(x)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\frac{\delta}{\delta J}A_2\frac{\delta}{\delta J}} \end{aligned} \tag{7A.2.36}$$

故式 (7A.2.32) 的右端为

$$\left[J(x) - (A_2\cdot\frac{\delta}{\delta J})(x)\right]\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\frac{\delta}{\delta J}A_2\frac{\delta}{\delta J}}\mathrm{e}^{\frac{1}{2}J\cdot A_1^{-1}\cdot J} \tag{7A.2.37}$$

将上式代回式 (7A.2.32), 得到 $\tilde{Z}_0[J] \equiv \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\frac{\delta}{\delta J}A_2\frac{\delta}{\delta J}}\mathrm{e}^{\frac{1}{2}J\cdot A_1^{-1}\cdot J}$ 所满足的微分方程:

$$\left[(A_1+A_2)(x,y)\frac{\delta}{\delta J(y)} - J(x)\right]\tilde{Z}_0[J] = 0 \tag{7A.2.38}$$

其满足归一化条件 $\tilde{Z}_0[0] = 1$ 的解为

$$\tilde{Z}_0[J] = \mathrm{e}^{\frac{1}{2}J\cdot(A_1+A_2)^{-1}\cdot J} \tag{7A.2.39}$$

式 (7A.2.31) 得以证明. 显然, 若取 $N = Z_0[0] = 1$, $\tilde{Z}_0[J] = Z_0[J]$.

【练习】　证明如下的对易关系:

$$[F[\varphi], J(x)] \equiv \left[F\left[\frac{\delta}{\delta J}\right], J(x)\right] = \frac{\delta F}{\delta\varphi(x)}\left[\frac{\delta}{\delta J}\right] \tag{7A.2.40}$$

其中, 对易子的作用是针对 $Z[J]$ 而言的.

⟨5⟩ 多元泛函积分.

利用数学归纳法可以证明有如下的**多重泛函积分**的公式:

$$\int \mathfrak{D}\varphi_1\mathfrak{D}\varphi_2\cdots\mathfrak{D}\varphi_n\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\varphi_i^x\cdot A_{ij}^{xy}\cdot\varphi_j^y + J_i^x\cdot\varphi_i^x} = N\mathrm{e}^{\frac{1}{2}J_i^x\cdot A_{ij}^{-1xy}\cdot J_j^y} \tag{7A.2.41}$$

其中, $i,j = 1,2,\cdots,n$; $\mathfrak{D}\varphi_i = \left[\frac{\mathrm{d}\varphi_i}{\sqrt{2\pi}}\right]$; A_{ij} 是对称的而且其所有本征值 d_i 均满足式 (7A.2.18); 并且我们已详细地写出了遵从广义爱因斯坦规约的指标.

⟨6⟩ 复变量泛函积分.

它显然可以作为式 (7A.2.41) 的特例 (即二元情形) 和变换的技巧来讨论, 但这里我们仍愿从有限维向无限维过渡的思想来讨论.

设 z_i 是 n 个复变量, C 是一个有正的本征值的 $n\times n$ 厄米矩阵, Z 是分量为 z_i 的列矩阵, 则易证

$$\int\prod_{j=1}^{n}\frac{\mathrm{d}z_j^*\mathrm{d}z_j}{2\pi\mathrm{i}}\mathrm{e}^{-Z^+\cdot C\cdot Z}=(\det C)^{-1} \tag{7A.2.42}$$

这只要注意到在 $n=1$ 的情形时有

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}x\mathrm{d}y}{\pi}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}c(x^2+y^2)}=\frac{2}{c}$$

然后将 $z=x+\mathrm{i}y$, $z^*=x-\mathrm{i}y$, 以及根据雅可比行列式所得的式子 $\mathrm{d}z^*\mathrm{d}z=2\mathrm{i}\mathrm{d}x\mathrm{d}y$ 代入就得 $\int\frac{\mathrm{d}z^*\mathrm{d}z}{2\pi\mathrm{i}}\mathrm{e}^{-z^*cz}=c^{-1}$. 它的一个直接推广就是式 (7A.2.42).

仿照式 (7A.1.24) 的推导, 可得

$$\int\prod_{j=1}^{n}\frac{\mathrm{d}z_j^*\mathrm{d}z_j}{2\pi\mathrm{i}}\mathrm{e}^{-Z^+\cdot C\cdot Z+Z^+\cdot J+J^+\cdot Z}=(\det C)^{-1}\mathrm{e}^{J^+\cdot C^{-1}\cdot J} \tag{7A.2.43}$$

注意: 式 (7A.2.42) 和式 (7A.2.43) 可推广到 C 是一个所有本征值都有正实部的 $n\times n$ 任意复矩阵情形. 为了证明这一点, 我们可以从一个厄米矩阵开始, 它可以通过一个幺正变换实现对角化, $C=U^+\varLambda U$, 其中, $\varLambda=\mathrm{diag}\{\lambda_i\}$. 然后作一个有单位雅可比行列式的变量变换: $w_i=U_{ij}z_j$. 注意到式 (7A.2.43) 右边是 z_j^* 和 z_j 的解析函数, 因此可以解析延拓到复平面从而得到任意一个复矩阵 C_{ij}, 只要式 (7A.2.43) 左边的积分有意义, 即 C_{ij} 的所有本征值都有一个正实部.

将它过渡到泛函积分, 就有

$$\int\mathfrak{D}\varphi^*\mathfrak{D}\varphi\mathrm{e}^{-\varphi_x^*\cdot C_{xy}\cdot\varphi_y}=(\det C)^{-1}\equiv N \tag{7.A.2.44}$$

类似地, 在相差一常数因子 (它在实际运用中常不重要) 的情况下, 可将 $\mathfrak{D}\varphi^*\mathfrak{D}\varphi\equiv\mathfrak{D}[\varphi^*\varphi]$ 理解成 $[\mathrm{d}\varphi*\mathrm{d}\varphi]$. 此外还有

$$\int\mathfrak{D}\varphi^*\mathfrak{D}\varphi\mathrm{e}^{-\varphi_x^*\cdot C_{xy}\cdot\varphi_y+\zeta_x^*\varphi_x+\zeta_x\varphi_x^*}=N\mathrm{e}^{\zeta_x^*C_{xy}^{-1}\zeta_y} \tag{7A.2.45}$$

同样, 类似于式 (7A.2.5), 我们有关于**高斯权重**$\mathrm{e}^{-\varphi_x^*\cdot C_{xy}\cdot\varphi_y}$ 的泛函平均的**Wick 定理**:

$$\left\langle\prod_{i=1}^{n}\phi^*(x_i)\phi(y_i)\right\rangle_{\mathrm{G}}=\sum_{\substack{\{1,2,\cdots,n\}\\ \text{的所有置换}_P}}C^{-1}(y_{p1},x_1)C^{-1}(y_{p2},x_2)\cdots C^{-1}(y_{pn},x_n) \tag{7A.2.46}$$

仅因子 φ^* 和 φ 的数目相等的单项式才有非零的泛函平均.

例如:

$$\begin{aligned}&\langle\varphi^*(x_1)\varphi(y_1)\varphi^*(x_2)\varphi(y_2)\rangle_{\mathrm{G}}\\=&C^{-1}(y_1,x_1)C^{-1}(y_2,x_2)+C^{-1}(y_2,x_1)C^{-1}(y_1,x_2)\end{aligned}\tag{7A.2.47}$$

7A.3　反对易场的泛函积分

⟨1⟩ 首先考虑只有一个 Grassmann 变量 θ 的情形. 由于在定积分的定义中不能找到与普通变量的黎曼积分的类比, 所以我们参考具有平移不变性和为线性映射这两个基本性质来定义 Grassmann 变量的积分. 由于对普通变量 x 和常数 a 有 $\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}xf(x)=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}xf(x+a)$, 我们要求

$$\int\mathrm{d}\theta f(\theta)=\int\mathrm{d}\theta f(\theta+a)\tag{7A.3.1}$$

任何 $f(\theta)$ 均可展开为 $f(\theta)=a+b\theta(a,b$ 为普通的数), 代入式 (7A.3.1) 得 $\int\mathrm{d}\theta(a+b\theta)=\int\mathrm{d}\theta[a+b(\theta+a)]$, 再利用线性性, 知 $\int\mathrm{d}\theta ba=0$. 故我们定义

$$\int\mathrm{d}\theta\equiv\int\mathrm{d}\theta 1=0\tag{7A.3.2}$$

并且为了有一个非平庸的算符, 可定义

$$\int\mathrm{d}\theta\theta\equiv 1\tag{7A.3.3}$$

(注意: 上述的取值可任意), 这样

$$\int\mathrm{d}\theta f(\theta)=\int\mathrm{d}\theta(\alpha+\beta\theta)=\beta=\frac{\partial}{\partial\theta}f(\theta)\tag{7A.3.4}$$

所以 $\int\mathrm{d}\theta$ 实际上是一个导数.

$$\int\mathrm{d}\theta\equiv\frac{\partial}{\partial\theta}\tag{7A.3.5}$$

由 $\left\{\frac{\partial}{\partial\theta},\frac{\partial}{\partial\theta}\right\}=0$ 知

$$\int\mathrm{d}\theta\frac{\partial}{\partial\theta}f(\theta)=\frac{\partial}{\partial\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}f(\theta)=0\tag{7A.3.6}$$

它意味着有如下**分部积分法则**:

$$\int\mathrm{d}\theta f\frac{\partial}{\partial\theta}g=\pm\int\mathrm{d}\theta\frac{\partial}{\partial\theta}(fg)\mp\int\mathrm{d}\theta\frac{\partial f}{\partial\theta}g$$

其中, 对于右端符号, f 为偶元时取上面符号, f 为奇元时取下面符号. 再利用式 (7A.3.6) 知

$$\int \mathrm{d}\theta f \frac{\partial}{\partial\theta} g = \mp \int \mathrm{d}\theta \frac{\partial f}{\partial\theta} g \tag{7A.3.7}$$

我们也可定义**Grassmann 变量的δ函数**:

$$\delta(\theta-\theta') \equiv \theta-\theta' = \int \mathrm{d}\eta \mathrm{e}^{\eta(\theta-\theta')} \tag{7A.3.8}$$

它在 $\theta=\theta'$ 时为零, 且有

$$\delta(\theta-\theta')\delta(\theta-\theta') = 0 \tag{7A.3.9}$$

定义 (7A.3.8) 满足如下熟知的性质:

$$\int \mathrm{d}\theta \delta(\theta-\theta') f(\theta) = f(\theta') \tag{7A.3.10}$$

证明

$$\int \mathrm{d}\theta(\theta-\theta')(\alpha+\beta\theta) = \alpha+\beta\theta' = f(\theta')$$

有两点与普通变量时不同 (第一点从物理角度看是重要的):

(1) 从 $\int \mathrm{d}\theta\theta = 1$ 知 $\mathrm{d}\theta$ 的量纲 $[\mathrm{d}\theta]$ 是 θ 量纲 $[\theta]$ 的逆 (注意 $[\mathrm{d}x]=[x]$).

(2) **当变量θ改变时, 出现雅可比行列式的逆**. 例如:

若 $\theta' = a\theta$, 则

$$\mathrm{d}\theta' = a^{-1}\mathrm{d}\theta \tag{7A.3.11}$$

才能够使得 $\int \mathrm{d}\theta'\theta' = \int \mathrm{d}\theta\theta = 1$ 成立.

⟨2⟩ 在多个 Grassmann 变量 θ_i 的情形, 可类似地定义

$$\int \mathrm{d}\theta_i = 0 \quad (\forall i) \tag{7A.3.12}$$

$$\int \mathrm{d}\theta_i\theta_i = 1 \quad (\text{对}i\text{不求和}, \forall i) \tag{7A.3.13}$$

$$\int \mathrm{d}^n\theta(\theta_n\cdots\theta_2\theta_1) = 1 \tag{7A.3.14}$$

其中

$$\mathrm{d}^n\theta \equiv \mathrm{d}\theta_1\mathrm{d}\theta_2\cdots d\theta_n$$

$$\int \mathrm{d}^n\theta(\theta\text{的}r\text{次多项式}) = 0 \quad (r<n) \tag{7A.3.15}$$

$$\int \mathrm{d}^n\theta[af(\theta)+bg(\theta)] = a\int \mathrm{d}^n\theta f(\theta) + b\int \mathrm{d}^n\theta g(\theta) \tag{7A.3.16}$$

式中, a, b 为偶元; $f(\theta) \equiv f(\theta_1, \theta_2, \cdots, \theta_n)$. 对于 $\mathrm{d}\theta$, 我们还有

$$[\mathrm{d}\theta_i, \mathrm{d}\theta_j]_+ = [\mathrm{d}\theta_i, \theta_j]_+ = 0 \tag{7A.3.17}$$

类似于式 (7A.3.8), 定义

$$\delta^n(\theta - \theta') \equiv \prod_{j=1}^{n} (\theta_j - \theta'_j) = \int \mathrm{d}\eta \mathrm{e}^{\sum\limits_i \eta_i(\theta_i - \theta'_i)} \tag{7A.3.18}$$

其中

$$[\eta_i, \eta_j]_+ = [\eta_i, \theta_j]_+ = 0 \tag{7A.3.19}$$

令 $\overline{\mathrm{d}^n\theta} \equiv \mathrm{d}\theta_n \cdots \mathrm{d}\theta_2 \mathrm{d}\theta_1$. 类似于式 (7A.3.10), 有

$$\int \overline{\mathrm{d}^n\theta} \delta^n(\theta - \theta') f(\theta) = f(\theta') \tag{7A.3.20}$$

证明　因

$$\begin{aligned}
&\int \overline{\mathrm{d}^n\theta} \delta^n(\theta - \theta') \theta_{i_1} \theta_{i_2} \cdots \theta_{i_r} \quad (i_1 < i_2 < \cdots < i_r) \\
=& \int \mathrm{d}\theta_n \cdots \mathrm{d}\theta_2 \mathrm{d}\theta_1 (\theta_1 - \theta'_1)(\theta_2 - \theta'_2) \cdots (\theta_n - \theta'_n) \theta_{i_1} \theta_{i_2} \cdots \theta_{i_r} \\
=& \theta'_{i_1} \theta'_{i_2} \cdots \theta'_{i_r}
\end{aligned} \tag{7A.3.21}$$

将此公式应用于

$$\begin{aligned}
f(\theta) =& f(0) + \sum_i f_i \theta_i + \sum_{i_1 < i_2} f_{i_1 i_2} \theta_{i_1} \theta_{i_2} + \cdots \\
&+ \sum_{i_1 < i_2 < \cdots < i_r} f_{i_1 i_2 \cdots i_r} \theta_{i_1} \theta_{i_2} \cdots \theta_{i_r} + \cdots
\end{aligned} \tag{7A.3.22}$$

中的每一项, 就可导出式 (7A.3.20).

$f(\theta)$ 的傅里叶变换为

$$\bar{f}(\eta) \equiv \int \mathrm{d}^n\theta \mathrm{e}^{\sum\limits_i \theta_i \eta_i} f(\theta) \tag{7A.3.23}$$

可证明

$$f(\theta) = \int \overline{\mathrm{d}^n\eta} \mathrm{e}^{\sum\limits_i \eta_i \theta_i} \bar{f}(\eta) \tag{7A.3.24}$$

证明　注意到 $\mathrm{e}^{\pm \sum\limits_i \theta_i \eta_i}$ 为偶元, 且 $\mathrm{d}\theta_j(\theta'_j - \theta_j)$ 也为偶元. 这样

$$\overline{\mathrm{d}^n\theta'} \prod_{j=1}^{n} (\theta'_j - \theta_j) = \mathrm{d}\theta'_n \cdots \mathrm{d}\theta'_2 \mathrm{d}\theta'_1 (\theta'_1 - \theta_1)(\theta'_2 - \theta_2) \cdots (\theta'_n - \theta_n)$$

$$=\mathrm{d}\theta_n'(\theta_n'-\theta_n)\cdots\mathrm{d}\theta_2'(\theta_2'-\theta_2)\mathrm{d}\theta_1'(\theta_1'-\theta_1) \tag{7A.3.25}$$

由以上可知

$$\begin{aligned}
\text{式 (7A.3.24) 的右端} &= \int \overline{\mathrm{d}^n\eta}\mathrm{d}^n\theta'\mathrm{e}^{\sum\limits_i \eta_i(\theta_i-\theta_i')}f(\theta') \\
&= \int \mathrm{d}\eta_n\mathrm{e}^{\eta_n(\theta_n-\theta_n')}\mathrm{d}\theta_n'\cdots\mathrm{d}\eta_1\mathrm{e}^{\eta_1(\theta_1-\theta_1')}\mathrm{d}\theta_1' f(\theta') \\
&= \int (\theta_n'-\theta_n)\mathrm{d}\theta_n'\cdots(\theta_1'-\theta_1)\mathrm{d}\theta_1' f(\theta') \\
&= \int \overline{\mathrm{d}^n\theta'}\prod_{j=1}^{n}(\theta_j'-\theta_j)f(\theta') \\
&= \int \overline{\mathrm{d}^n\theta'}\delta^n(\theta_j'-\theta_j)f(\theta') = \text{式 (7A.3.24) 的左端}
\end{aligned}$$

对于变量变换, 我们有以下定理.

定理　若 $\theta_i'=\theta_i'(\theta)$, $\theta_i,\theta_i'\in A^-$, 则

$$\int \mathrm{d}^n\theta' = \int \mathrm{d}^n\theta\left(\det\frac{\partial\theta'}{\partial\theta}\right)^{-1} \tag{7A.3.26}$$

证明　我们归纳地予以证明.

当 $n=1$ 时, 设 $\theta'=\theta'(\theta)$, 则

$$\int \mathrm{d}\theta' = \frac{\partial}{\partial\theta'} = \frac{\partial}{\partial\theta}\frac{\partial\theta}{\partial\theta'} = \int \mathrm{d}\theta\left[\frac{\partial\theta'}{\partial\theta}\right]^{-1}$$

故 $n=1$ 时成立.

当 $n\geqslant 2$ 时, 设

$$\int \mathrm{d}\theta_n'\mathrm{d}\theta_{n-1}'\cdots\mathrm{d}\theta_2' = \int \mathrm{d}\theta_n'\mathrm{d}\theta_{n-1}\cdots\mathrm{d}\theta_1 J_{n-1}^{-1}(\theta_n',\theta) \tag{7A.3.27}$$

其中

$$J_{n-1}(\theta_n,\theta) = \left(\det\frac{\partial\theta_i'}{\partial\theta_j}\right)_{\theta_n'} \quad (i,j=1,2,\cdots,n-1) \tag{7A.3.28}$$

再变换 $\theta_n'\to\theta_n$, 其他不变, 得

$$\int \mathrm{d}\theta_n' J_{n-1}^{-1}(\theta_n',\theta) = \int \mathrm{d}\theta_n\left(\frac{\partial\theta_n'}{\partial\theta_n}\right)^{-1} J_{n-1}^{-1}(\theta_n',\theta) \tag{7A.3.29}$$

注意: 在式 (7A.3.28) 中, 右端的 θ_n' 是常数, 即 $\theta_n'=\theta_n'(\theta_1,\theta_2,\cdots,\theta_n)=\mathrm{const}$(可见 θ_n 是 $\theta_j(j=1,2,\cdots,n-1)$ 的隐函数), 故将两端对 θ_j 求导得 $\dfrac{\partial\theta_n'}{\partial\theta_j}+\dfrac{\partial\theta_n'}{\partial\theta_n}\dfrac{\partial\theta_n}{\partial\theta_j}=0$,

由此知

$$\left.\frac{\partial\theta_i'}{\partial\theta_j}\right|_{\theta_n'}=\left.\frac{\partial\theta_i'}{\partial\theta_j}\right|_{\theta_n}+\left.\frac{\partial\theta_n}{\partial\theta_j}\right|_{\theta_n'}\frac{\partial\theta_i'}{\partial\theta_n}=\left.\frac{\partial\theta_i'}{\partial\theta_j}\right|_{\theta_n}-\frac{\partial\theta_n'}{\partial\theta_j}\left(\frac{\partial\theta_n'}{\partial\theta_n}\right)^{-1}\frac{\partial\theta_i'}{\partial\theta_n} \tag{7A.3.30}$$

再利用一个恒等式:

$$\begin{aligned}&\det\frac{\partial\theta_i'}{\partial\theta_j}\quad(i,j=1,2,\cdots,n)\\=&\frac{\partial\theta_n'}{\partial\theta_n}\det\left[\frac{\partial\theta_i'}{\partial\theta_j}-\frac{\partial\theta_n'}{\partial\theta_j}\left(\frac{\partial\theta_n'}{\partial\theta_n}\right)^{-1}\frac{\partial\theta_i'}{\partial\theta_n}\right]\quad(i,j=1,2,\cdots,n-1)\end{aligned} \tag{7A.3.31}$$

所以

$$J_n^{-1}=\left(\frac{\partial\theta_n'}{\partial\theta_n}\right)^{-1}J_{n-1}^{-1}(\theta_n',\theta_n) \tag{7A.3.32}$$

另外, 因矩阵元 $\partial\theta_i'/\partial\theta_j$ 均属于 A^+, 行列式是确切定义了的, 故式 (7A.3.26) 成立.

对于既有对易变量 x_a 又有反对易变量 θ_i 时的混合变量变换:

$$\begin{cases}x_a'=x_a'(x,\theta)\\ \theta_i'=\theta_i'(x,\theta)\end{cases} \tag{7A.3.33}$$

我们有

$$\int\mathrm{d}^m x'\mathrm{d}^n\theta'=\int\mathrm{d}^m x\mathrm{d}^n\theta\left(\det\frac{\partial x'}{\partial x}\right)_\theta\left(\det\frac{\partial\theta'}{\partial\theta}\right)^{-1} \tag{7A.3.34}$$

证明　首先, 作变换 $(\theta,x)\to(\theta,x')$, 则

$$\int\mathrm{d}^m x'\mathrm{d}^n\theta=\int\mathrm{d}^m x\mathrm{d}^n\theta\left(\det\frac{\partial x'}{\partial x}\right)_\theta$$

其中

$$\left(\det\frac{\partial x_a'}{\partial x_b}\right)_\theta=\det\left[\frac{\partial x_a'}{\partial x_b}-\frac{\partial x_a'}{\partial\theta_i}\left(\frac{\partial\theta'}{\partial\theta}\right)^{-1}_{ij}\frac{\partial\theta_j'}{\partial x_b}\right] \tag{7A.3.35}$$

其次, 作代换 $\theta_i\to\theta_i'(x,\theta)$, 则

$$\mathrm{d}^n\theta\to\mathrm{d}^n\theta'=\mathrm{d}^n\theta\left(\det\frac{\partial\theta_i'}{\partial\theta_j}\right)^{-1} \tag{7A.3.36}$$

由此知式 (7A.3.34) 成立.

从式 (7A.3.26) 和式 (7A.3.34) 可得出**重要结论**: 与复变量的变换律不同, Grassmann 变量的线性变换律中出现的不是雅可比行列式本身而是雅可比行列式的**逆**!

⟨3⟩ 考虑如下的高斯型积分:

$$I_N(M) \equiv \int \mathrm{d}\theta_1 \mathrm{d}\theta_2 \cdots \mathrm{d}\theta_N \mathrm{e}^{-\theta^{\mathrm{T}} \cdot M \cdot \theta} \tag{7A.3.37}$$

其中, M 是 $N \times N$ 的矩阵, 其矩阵元 m_{ij} 是普通数. 由于 $\theta_i m_{ij} \theta_j$ 中 $\theta_i \theta_j$ 对于 i, j 是反称的, 故可以设 M 是反称的, 即满足 $m_{ij} = -m_{ji}$.

我们将证明

$$I_N(M) = 2^{N/2} \sqrt{\det M} \tag{7A.3.38}$$

证明 显然当 N 为奇数时, 应该有 $I_N = 0$(当 N 为奇数时), 这是因 $\mathrm{d}\theta_N$, $\mathrm{d}\theta_{N-1}, \cdots, \mathrm{d}\theta_1$ 有奇数个, 而被积表达式中 θ 总是成对出现的. 再注意到奇数阶的反称矩阵的行列式必为零, 所以 N 为奇数时式 (7A.3.38) 成立.

所以我们仅需讨论 $N = 2n$ 为偶数的情形, 这时

$$I_{2n} = \int \mathrm{d}\theta_1 \mathrm{d}\theta_2 \cdots \mathrm{d}\theta_{2n} \mathrm{e}^{-\sum\limits_{ij} \theta_i m_{ij} \theta_j} \tag{7A.3.39}$$

为了计算上式, 我们先看如下积分:

$$(I_{2n})^2 = \int \mathrm{d}\theta_1 \mathrm{d}\theta_2 \cdots \mathrm{d}\theta_{2n} \mathrm{d}\theta'_1 \mathrm{d}\theta'_2 \cdots \mathrm{d}\theta'_{2n} \mathrm{e}^{-\sum\limits_{ij} m_{ij}(\theta_i\theta_j + \theta'_i\theta'_j)} \tag{7A.3.40}$$

作代换

$$\begin{cases} \eta_k = \theta_k + \mathrm{i}\theta'_k \\ \bar{\eta}_k = \theta_k - \mathrm{i}\theta'_k \end{cases} \tag{7A.3.41}$$

则有 $\theta_i\theta_j + \theta'_i\theta'_j = \dfrac{1}{2}(\bar{\eta}_i\eta_j - \bar{\eta}_j\eta_i)$, 以及

$$\int \mathrm{d}\theta_1 \mathrm{d}\theta_2 \cdots \mathrm{d}\theta_{2n} \mathrm{d}\theta'_1 \mathrm{d}\theta'_2 \cdots \mathrm{d}\theta'_{2n} = \int \mathrm{d}\eta_1 \mathrm{d}\eta_2 \cdots \mathrm{d}\eta_{2n} \mathrm{d}\bar{\eta}_1 \mathrm{d}\bar{\eta}_2 \cdots \mathrm{d}\bar{\eta}_{2n} J^{-1}$$

其中, $J = \dfrac{\partial(\theta, \theta')}{\partial(\eta, \bar{\eta})} = \dfrac{1}{(-1)^n 2^{2n}}$, 所以

$$\begin{aligned} (I_{2n})^2 &= (-1)^n 2^{2n} \int \mathrm{d}\eta_1 \mathrm{d}\eta_2 \cdots \mathrm{d}\eta_{2n} \mathrm{d}\bar{\eta}_1 \mathrm{d}\bar{\eta}_2 \cdots \mathrm{d}\bar{\eta}_{2n} \mathrm{e}^{-\sum\limits_{i,j} \bar{\eta}_i m_{ij} \eta_j} \\ &= (-1)^{2n^2} 2^{2n} \int \mathrm{d}\eta_1 \mathrm{d}\bar{\eta}_1 \mathrm{d}\eta_2 \mathrm{d}\bar{\eta}_2 \cdots \mathrm{d}\eta_{2n} \mathrm{d}\bar{\eta}_{2n} \mathrm{e}^{-\sum\limits_{ij} \bar{\eta}_i m_{ij} \eta_j} \\ &\equiv 2^{2n} \tilde{I}_{2n} \end{aligned} \tag{7A.3.42}$$

指数对 $\tilde{I}$ 有非零贡献的项有

$$\sum_{\substack{\text{所有置换} \\ \{j_1 j_2 \cdots j_{2n}\}}} m_{(2n)j_{2n}} \cdots m_{2j_2} m_{1j_1} \bar{\eta}_{2n} \eta_{j_{2n}} \cdots \bar{\eta}_2 \eta_{j_2} \bar{\eta}_1 \eta_{j_1} \tag{7A.3.43}$$

交换生成元次序使之成为 $\bar{\eta}_{2n}\eta_{2n}\cdots\bar{\eta}_2\eta_2\bar{\eta}_1\eta_1$ 时, 所出现的符号正是置换 $\{j_1j_2\cdots j_{2n}\}$ 的号差. 故由式 (7A.3.43) 看出

$$\tilde{I}_{2n}=\int \mathrm{d}\eta_1\mathrm{d}\bar{\eta}_1\mathrm{d}\eta_2\mathrm{d}\bar{\eta}_2\cdots\mathrm{d}\eta_{2n}\mathrm{d}\bar{\eta}_{2n}\mathrm{e}^{-\sum\limits_{ij}\bar{\eta}_i m_{ij}\eta_j}=\det M \tag{7A.3.44}$$

代入式 (7A.3.42) 即在 N 为偶数时证得式 (7A.3.38).

进一步, 考虑积分:

$$I_N(M,\chi)\equiv\int \mathrm{d}\theta_1\mathrm{d}\theta_2\cdots\mathrm{d}\theta_N\mathrm{e}^{-\theta^{\mathrm{T}}M\theta+\chi^{\mathrm{T}}\theta} \tag{7A.3.45}$$

其中, χ_i 也是 Grassmann 数, M 是反称矩阵, 且

$$[\chi_i,\chi_j]_+=0,\quad [\chi_i,\theta_j]_+=0 \tag{7A.3.46}$$

θ,χ 形成两个 Grassmann 代数的直和.

令

$$\theta'=\theta+\frac{1}{2}M^{-1}\chi \tag{7A.3.47}$$

则易得出

$$I_N(M,\chi)=I_N(M)\mathrm{e}^{-\frac{1}{4}\chi^{\mathrm{T}}M^{-1}\chi} \tag{7A.3.48}$$

以上公式可以推广到对复 Grassmann 变量的积分, 类似于式 (7A.3.44), 有

$$\tilde{I}_N=\int\prod_{i=1}^{N}(\mathrm{d}\bar{\eta}_i\mathrm{d}\eta_i)\mathrm{e}^{-\bar{\eta}^{\mathrm{T}}M\eta}=\det M \tag{7A.3.49}$$

类似可证

$$\tilde{I}_N(\chi,\bar{\chi})\equiv\int\prod_{i=1}^{N}(\mathrm{d}\bar{\eta}_i\mathrm{d}\eta_i)\mathrm{e}^{-\eta^{\mathrm{T}}M\eta+\bar{\chi}^{\mathrm{T}}\eta+\chi^{\mathrm{T}}\bar{\eta}}=(\det M)\mathrm{e}^{\bar{\chi}^{\mathrm{T}}M^{-1}\chi} \tag{7A.3.50}$$

这只要令 $\eta'=\eta-M^{-1}\chi$, $\bar{\eta}'=\bar{\eta}-M^{-1}\bar{\chi}$ 就可方便地证出.

注意: 式 (7A.3.49) 和式 (7A.3.50) 可推广到**矩阵 M 为任何可逆复矩阵**的情形. 证明可以用将指数因子展开的方法, 并注意到只有那些有 $2N$ 个变量 $\bar{\eta}$、η_i 的线性项才不为零.

⟨4⟩ 如果我们用 $\langle(\cdots)\rangle_{\mathrm{G}}$ 代表如下的有高斯权重的平均:

$$\langle(\cdots)\rangle_{\mathrm{G}}\equiv\frac{\displaystyle\int\left(\prod_{i=1}^{N}\mathrm{d}\bar{\eta}_i\mathrm{d}\eta_j\right)(\cdots)\mathrm{e}^{-\bar{\eta}M\eta}}{\displaystyle\int\left(\prod_{i=1}^{N}\mathrm{d}\bar{\eta}_i\mathrm{d}\eta_j\right)\mathrm{e}^{-\bar{\eta}M\eta}} \tag{7A.3.51}$$

则

$$\begin{cases} \dfrac{\partial}{\partial \bar{\chi}_i} \tilde{I}_N(\chi, \bar{\chi})|_{\eta=\bar{\eta}=0} = (\det M)\langle \eta_i \rangle_{\mathrm{G}} \\ \dfrac{\partial}{\partial \chi_i} \tilde{I}_N(\chi, \bar{\chi})|_{\eta=\bar{\eta}=0} = (\det M)\langle \bar{\eta}_i \rangle_{\mathrm{G}} \end{cases} \tag{7A.3.52}$$

上式是微扰论的基础. 利用上式不难得知

$$\int \prod_{i=1}^{N} (\mathrm{d}\bar{\eta}_i \mathrm{d}\eta_i) \mathrm{e}^{-\eta^{\mathrm{T}} M \eta + V(\eta, \bar{\eta}) + \bar{\chi}^{\mathrm{T}} \eta + \chi^{\mathrm{T}} \bar{\eta}} = \mathrm{e}^{V\left(\frac{\partial}{\partial \bar{\chi}}, \frac{\partial}{\partial \chi}\right)} (\det M) \mathrm{e}^{-\bar{\chi}^{\mathrm{T}} M^{-1} \chi} \tag{7A.3.53}$$

类似于式 (7A.3.45), 我们也有关于高斯权重的平均的**Wick 定理**:

$$\begin{aligned} \left\langle \prod_{k=1}^{N} \eta_{i_k} \bar{\eta}_{j_k} \right\rangle_{\mathrm{G}} &\equiv \frac{\displaystyle\int \left(\prod_{i=1}^{N} \mathrm{d}\bar{\eta}_i \mathrm{d}\eta_j \right) \left(\prod_{k=1}^{N} \eta_{i_k} \bar{\eta}_{j_k} \right) \mathrm{e}^{-\bar{\eta} M \eta}}{\displaystyle\int \left(\prod_{i=1}^{N} \mathrm{d}\bar{\eta}_i \mathrm{d}\eta_j \right) \mathrm{e}^{-\bar{\eta} M \eta}} \\ &= (\det M)^{-1} \prod_{k=1}^{N} \frac{\partial}{\partial \bar{\chi}_{i_k}} \frac{\partial}{\partial \chi_{j_k}} \tilde{I}_N(\chi, \bar{\chi})|_{\chi=\bar{\chi}=0} \\ &= \prod_{k=1}^{N} \frac{\partial}{\partial \bar{\chi}_{i_k}} \frac{\partial}{\partial \chi_{j_k}} \mathrm{e}^{-\bar{\chi}^{\mathrm{T}} M^{-1} \chi}|_{\chi=\bar{\chi}=0} \\ &= \sum_{\substack{\{j_1 j_2 \cdots j_n\} \\ \text{的置换} P}} \varepsilon(P) (M^{-1})_{j_{P1} i_1} (M^{-1})_{j_{P2} i_2} \cdots (M^{-1})_{j_{Pn} i_n} \end{aligned} \tag{7A.3.54}$$

其中, $\varepsilon(P)$ 是置换 P 的号差.

当有限维 Grassmann 代数过渡到无限维 Grassmann 代数时, 我们可得到关于反对易经典场的一系列类似公式. 例如, 如下的有外源的高斯泛函积分:

$$\begin{aligned} Z_0(\bar{\eta}, \eta) &\equiv \int \mathfrak{D}\bar{\psi} \mathfrak{D}\psi \mathrm{e}^{\int \mathrm{d}^d x [-\bar{\psi}^{\mathrm{T}}(x) \hat{M}(x) \psi(x) + \bar{\eta}(x) \psi(x) + \eta(x) \bar{\psi}(x)]} \\ &= (\det M) \mathrm{e}^{-\int \mathrm{d}^d x \mathrm{d}^d y \bar{\eta}(x) \hat{M}^{-1}(x, y) \eta(y)} \end{aligned} \tag{7A.3.55}$$

$$\begin{aligned} Z(\bar{\eta}, \eta) &\equiv \int \mathfrak{D}\bar{\psi} \mathfrak{D}\psi \mathrm{e}^{\int \mathrm{d}^d x [-\bar{\psi}^{\mathrm{T}}(x) \hat{M}(x) \psi(x) + V(\bar{\psi}, \psi) + \bar{\eta}(x) \psi(x) + \eta(x) \bar{\psi}(x)]} \\ &= \mathrm{e}^{-\int \mathrm{d}^d x V\left(\frac{\delta}{\delta \eta}, \frac{\delta}{\delta \bar{\eta}}\right)} Z_0(\bar{\eta}, \eta) \end{aligned} \tag{7A.3.56}$$

以及类似的 Wick 定理等.

附录 7B　式 (7.3.34) 的证明

先设 $\tau > \tau'$, 则

$$\begin{aligned}
g_{\lambda\lambda'}(\tau,\tau') &= -\langle T\hat{\psi}_\lambda(\tau)\hat{\psi}^+_{\lambda'}(\tau')\rangle = -\langle \hat{\psi}_\lambda(\tau)\hat{\psi}^+_{\lambda'}(\tau')\rangle \\
&= -\frac{1}{Z}\mathrm{tr}\left(\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}^\mu}\hat{\psi}_\lambda(\tau)\hat{\psi}^+_{\lambda'}(\tau')\right) \\
&= -\frac{1}{Z}\mathrm{tr}\left(\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}^\mu}\mathrm{e}^{\tau\hat{H}^\mu}\hat{\psi}_\lambda\mathrm{e}^{-\tau\hat{H}^\mu}\mathrm{e}^{\tau'\hat{H}^\mu}\hat{\psi}'^+_\lambda\mathrm{e}^{-\tau'\hat{H}^\mu}\right) \\
&= -\frac{1}{Z}\mathrm{tr}\left(\mathrm{e}^{-\int_\tau^\beta \mathrm{d}\tau\hat{H}^\mu}\hat{\psi}_\lambda\mathrm{e}^{-\int_{\tau'}^\tau \mathrm{d}\tau\hat{H}^\mu}\hat{\psi}^+_{\lambda'}\mathrm{e}^{-\int_0^{\tau'} \mathrm{d}\tau\hat{H}^\mu}\right)
\end{aligned}$$

故有

$$g_{\lambda\lambda'}(\tau,\tau') = -\frac{1}{Z}\mathrm{tr}\left(T\mathrm{e}^{-\int_0^\beta \mathrm{d}\tau\hat{H}^\mu}\hat{\psi}_\lambda(\tau)\hat{\psi}^+_{\lambda'}(\tau')\right) \tag{7B.1}$$

这里利用了 $\hat{H}^\mu$ 的指数函数 (玻色算符) 在编时算符 T 内可以任意移动而不会影响结果.

对于 $\tau < \tau'$ 情形, 可以类似证明式 (7B.1) 照样成立.

这样, 由式 (7.1.83) 知, 可以将编时乘积转换成路径积分, 并且由于式 (7.3.32) 即可得知式 (7.3.34) 成立.

第八章　相变、输运和重整化群

第一节　引　　言

标度和重整化是量子场论中优美且意义深刻的概念中的典型例子. 在此基础上发展出的重整化群(RG) 方法是一种强有力的有效工具, 它已经成功地应用于一大类物理问题, 从经典力学到量子多粒子体系, 从混沌、渗滤到非平衡量子输运等. 然而限于篇幅, 在本章仅讨论应用于相变问题和量子输运问题中的重整化群, 即使这样, 我们仍然能从中了解到重整化群方法在各种应用中的某些共同特征以及它的用途的多样性.

相变可以是由温度驱动的, 也可以是由描述体系基本相互作用的不同参量之间的竞争所引起的, 后者又专称为 "**量子相变**". 一般来说, 强度量 (如压强, 温度, 电场强度, 磁场强度等) 是控制宏观系统发生相变的参数. 相变还可以按系统的自由能 F 在相变点的行为而分成不同的级. 如果在相变点系统的自由能连续而其一阶导数不连续, 则称为一级相变. 若自由能本身及其一阶导数连续, 但其二阶导数不连续, 则为二级相变. 二级相变的相变点也称为**临界点**. 在临界点附近, 体系表现出一系列新的物理现象, 被称为 "**临界现象**".

与一级相变相比较, 二级相变除了自由能函数行为有所不同外, 还有如下不同的特点：①对于前者, 相变前后体系的宏观状态会发生突变；而对于后者, 体系的宏观状态在相变前后却是连续变化的. 故二级相变又被称为 "**连续相变**". ②对于前者, 相变时有相变潜热及体积变化, 而对于后者却没有. ③ 前者有过热过冷的亚稳态存在, 相变点为两相共存区, 而对于后者, 尽管在相变前后宏观状态为连续变化, 但微观对称性发生突变, 因而无亚稳态也无两相共存区. 本章只考虑二级相变.

我们定义一个表示体系有序程度的被称为 "**序参量**" 的物理量来定量地描述相变过程. 有序度改变意味着对称性质的变化. 通常低温相的对称性较低有序度较高而高温相对称性较高有序度较低. 不同体系的序参量是不同的. 例如, 对各向同性的铁磁体, 在高温顺磁相, 微观磁矩的平均值为零, 自发磁化强度 $\underline{M} = 0$, 但在低温铁磁相, 微观磁矩的平均值不再是零, 体系有非零的自发磁化强度 $\underline{M}$. 从而体系出现磁有序, 自发磁化强度的大小表示有序的程度, 故 $\underline{M}$ 是铁磁相变中的序参量. 从顺磁相到铁磁相, 体系的对称性突然减小, 这称为**对称性破缺**. 对于超导转变, 超导体的能隙参量 $\varDelta$ 就是序参量, 要激发一个电子或空穴, 所需要的能量必须要大于 $\varDelta$ 的绝对值. 在超导–正常转变点, 能隙参量 $\varDelta$ 趋于零. 在二级相变中, 绝对值在临

界点上连续地趋于零是序参量的共同特征.

除序参量外, 另一个感兴趣的问题是物理量在临界点附近的行为. 实验观测和理论研究都表明, 在临界点附近, 某些量可以表达成幂函数的形式, 其中的指数一般是非整数, 称为**临界指数**. 我们用 t 来度量体系所在点与临界点之间的距离 (注意这里的符号 t 不是指时间). 例如, 在铁磁相变中, $t \equiv (T - T_{\mathrm{C}})/T_{\mathrm{C}}$, 其中, T_{C} 是临界温度. 如下一些量在临界点附近的行为可以借助于各种临界指数用以下方式来表达.

(1) 自由能密度的奇异部分 f_{S}:

$$f_{\mathrm{S}} \propto |t|^{2-\alpha} \tag{8.1.1}$$

(2) 序参量 $m \equiv -\partial f_{\mathrm{S}}/\partial h$(其中, h 是与序参量 m 共轭的场):

$$m \propto |t|^{\beta} \tag{8.1.2}$$

在铁磁相变中, m 就是磁化强度, h 代表磁场.

(3) 序参量感应率(susceptibility)$\chi \equiv -\partial^2 f_{\mathrm{S}}/\partial h^2$:

$$\chi \propto |t|^{-\gamma} \tag{8.1.3}$$

在铁磁相变中, χ 代表磁化率.

(4) 关联长度 ξ(它表征体系关联区域的大小):

$$\xi \propto |t|^{-\nu} \tag{8.1.4}$$

(5) 在临界点处, 序参量与共轭场的关系:

$$m(t=0,h) \propto h^{1/\delta} \tag{8.1.5}$$

此外, 还有一个重要的临界指数 η, 它与序参量关联函数在临界点的行为相联系.

(6) 序参量关联函数$G(r)$:

$$G(r) \propto \frac{1}{r^{d-2+\eta}} \tag{8.1.6}$$

其中, d 是空间维数. 在铁磁相变中, $G(r)$ 为自旋–自旋关联函数 (参见式 (8.2.16)).

由式 (8.1.1)∼ 式 (8.1.8) 不难看出, 一些热力学函数在临界点呈现出奇异性, 例如, 在铁磁相变中, 由于比热为 $C_h = -T^2\partial_T^2 f_{\mathrm{S}}$, 利用式 (8.1.1) 得

$$C_h \propto |t|^{-\alpha} \tag{8.1.7}$$

由于 α 是正数, 故比热在临界点趋于无穷. 同样由式 (8.1.3) 可看出磁化率也在临界点发散. 由于关联函数描述了涨落行为, 所以式 (8.1.6) 能反映在临界点有强的涨落. 例如, 气–液相变中, 强的密度涨落引起光的强烈散射 (临界乳光); 而在铁磁相变中的自旋密度涨落可用光散射观测到. 这种反常大的涨落, 正反映体系内部进行着调整, 孕育着新相的产生. 由式 (8.1.4) 可看出, 当趋近于临界点时, 关联长度 ξ 趋于无穷大, 这是临界点的本质特征, 也是标度理论的基础. 式 (8.1.1)∼ 式 (8.1.6) 也是在相变点体系是 "自相似的" 一种反映.

式 (8.1.1)∼ 式 (8.1.6) 中的临界指数集合具有某种普适性, 我们无需对每个相变去发明一组不同的临界指数集合, 并且临界指数只是这样的 "数", 它们最多仅依赖于无量纲的特征量 (如时间空间的维度, 序参量的分量数). 上面引入的临界指数并非是独立的, 它们之间可以通过下面将要介绍的一些标度关系而相互联系. 特别重要的是临界指数可以通过实验测定 (其中 ν 不能直接测量, 需要由实验数据推算), 也可以用理论计算. 适当的理论框架就是重整化群, 这将是本章重点讨论的对象.

第二节 标 度 理 论

标度理论是先于重整化群技术而建立的一种唯象理论, 虽然它不能计算临界指数, 但可以建立起临界指数之间的关系, 即**标度律**. 标度理论是建立在 "标度假设" 基础之上的, 它的基本思想是: 当趋于临界点时, 关联长度 ξ 趋于无穷. 热力学量的所有奇异性均来自 ξ 的这种奇异性. 此时 ξ 是唯一的特征长度. 其他一切有限大小的长度 (如格点间距) 的影响都可以忽略, 任何尺度变换将不改变自由能的函数形式, 仅改变其变量的标度.

为了导出铁磁相变中的标度关系, Widom 提出如下的**标度假设**:

在临界点附近, 自由能密度 $f_{\mathrm{S}}(t,h)$ 是一个 "广义" 齐次函数, 即存在两个参数 (称为变量的**标度幂**)a,b, 对于任意的 λ 值, 有

$$f_{\mathrm{S}}(\lambda^a t,\lambda^b h)=\lambda f_{\mathrm{S}}(t,h) \tag{8.2.1}$$

"广义" 是指 a,b 不必相等且可以是非整数.

将式 (8.2.1) 对变量 h 求导, 得

$$m(\lambda^a t,\lambda^b h)=\lambda^{1-b}m(t,h) \tag{8.2.2}$$

式中, 取 $h=0,t\to 0^+$, 则有 $m(t,0)=\lambda^{b-1}m(\lambda^a t,0)$, 而由式 (8.1.2) 知 $m(t,0)=c_{tm}t^\beta$, $m(\lambda^a t,0)=c_{tm}(\lambda^a t)^\beta$ (其中, c_{tm} 为常数) . 故有

$$\beta=\frac{1-b}{a} \tag{8.2.3}$$

在式 (8.2.2) 中, 令 $t=0, h\to 0$, 得 $m(0,\lambda^b h)=\lambda^{1-b}m(0,h)$, 而由式 (8.1.5) 知, 当 $h\to 0$ 时, $m(0,h)=c_{hm}h^{1/\delta}$, $m(0,\lambda^b h)=c_{hm}(\lambda^b h)^{1/\delta}$ (其中, c_{hm} 为常数). 故有

$$\delta=\frac{b}{1-b} \tag{8.2.4}$$

将式 (8.2.2) 对 h 求导, 得 $\lambda^{2b}\chi(\lambda^a t,\lambda^b h)=\lambda\chi(t,h)$, 而由式 (8.1.3) 知, 当取 $h=0$, $t\to 0^+$ 时, 有 $\chi(t,0)=c_{t\chi}t^{-\gamma}, \chi(\lambda^a t,0)=c_{t\chi}(\lambda^a t)^{-\gamma}$ (其中, $c_{t\chi}$ 为常数). 故有

$$\gamma=\frac{2b-1}{a} \tag{8.2.5}$$

在式 (8.2.1) 中取 $h=0$, $t\to 0^+$, 有 $f_{\mathrm{S}}(\lambda^a t,0)=\lambda f_{\mathrm{S}}(t,0)$, 又由式 (8.1.1) 知, $f_{\mathrm{S}}(t,0)=c_{tF}t^{2-\alpha}$, $f_{\mathrm{S}}(\lambda^a t,0)=c_{tF}(\lambda^a t)^{2-\alpha}$ (其中, c_{tF} 为常数), 故有

$$\alpha=2-\frac{1}{a} \tag{8.2.6}$$

这样, 由式 (8.2.3)$\sim$ 式 (8.2.6) 可得如下**标度关系**:

$$\alpha+2\beta+\gamma=2 \quad \text{(Rushbrooke)} \tag{8.2.7}$$

$$\beta(\delta-1)=\gamma \quad \text{(Widom)} \tag{8.2.8}$$

下面进一步利用 Kadanoff 理论来得出临界指数 η,ν 和其他临界指数之间的所谓超标度关系. 在这种理论中, 引进了标度变换的概念和标度不变性假设. 虽然本质上, 它只是将前面所说的标度假设换了一种形式出现, 但这种形式上的改变, 不仅可以使得我们对标度假设有更深的理解, 而且它还成为了重整化群理论产生的基础.

考虑一个受到外磁场 h 作用的 d 维 Ising 模型. 设自旋总数为 N, 配位数为 z_q, 系统的哈密顿为

$$H=-J\sum_{\langle ij\rangle}^{z_qN/2}s_is_j-\mu_{\mathrm{B}}h\sum_{i}^{N}s_i\equiv H\{s_i\} \tag{8.2.9}$$

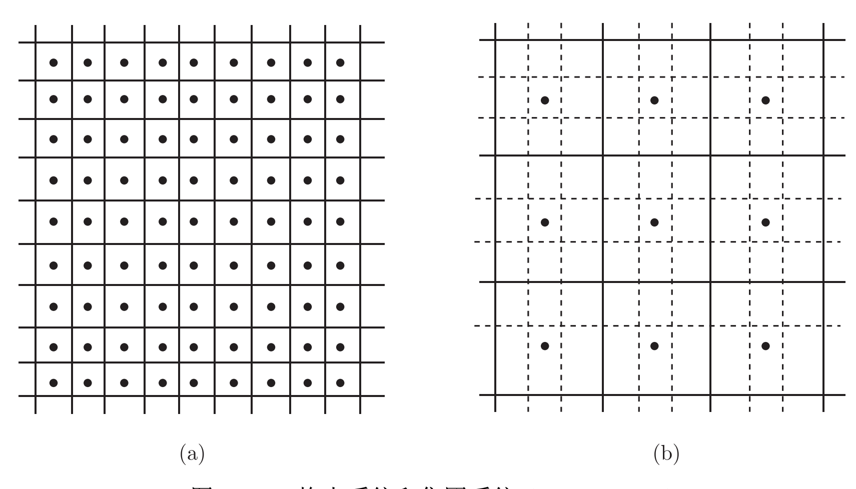
其中, μ_{B} 为玻尔磁子; 自旋 $s_i=\pm 1$; $\langle ij\rangle$ 表示近邻对, 不同近邻对的数目为 $z_qN/2$. 设想把晶格分成许多大小相同, 边长为 La_0(a_0 为原晶格常数) 的 d 维超立方 (以后称其为集团 (**block**)). 显然每个集团内含有 L^d 个自旋, 故 N 个格点被分成了 N/L^d 个集团. 图 8.1.1(a) 和 (b) 分别为 $d=2$, $L=3$ 情况下的格点系统和集团系统的示意图.

对每个集团内的所有自旋采取某种形式的平均, 使得每个集团也可以用一个有效自旋 S_I 来描述, 并且 S_I 的取值也为 ± 1. 显然集团的自旋之间也存在最近邻相

互作用. 这样以集团作为最基本单元, 其哈密顿可以写为

$$H\{S_I\} = -J_L \sum_{\langle IJ \rangle}^{z_q NL^{-d}/2} S_I S_J - \mu_{\mathrm{B}} h_L \sum_{I}^{NL^{-d}} S_I \tag{8.2.10}$$

其中, 右边第一项的求和遍及 $z_q NL^{-d}/2$ 个集团有效自旋近邻对; 第二项求和遍及 NL^{-d} 个集团有效自旋.



(a)　(b)

图 8.1.1　格点系统和集团系统 $(d = 2, L = 3)$

比较集团系统和格点系统的哈密顿可以看出, 除了耦合常数的替代 $J, h \to J_L, h_L$ 外, 两者的表达式的形式是相同的. 因此可知从这两个系统的配分函数以及由此计算出的总自由能 (奇异部分) 也应该相同:

$$F_{\mathrm{S}}(t_L, h_L) = F_{\mathrm{S}}(t, h) \tag{8.2.11}$$

故每个集团和每个格点的自由能奇异部分 (即对应的自由能密度奇异部分) 之间应该满足

$$f_{\mathrm{S}}(t_L, h_L) = L^d f_{\mathrm{S}}(t, h) \tag{8.2.12}$$

不妨设

$$t_L = L^{y_t} t, \quad h_L = L^{y_h} h \tag{8.2.13}$$

则式 (8.2.12) 成为

$$f_{\mathrm{S}}(L^{y_t} t, L^{y_h} h) = L^d f_{\mathrm{S}}(t, h) \tag{8.2.14}$$

只要令 $\lambda = L^d$, 以及

$$a = y_t/d, \quad b = y_h/d \tag{8.2.14a}$$

则式 (8.2.14) 就成为

$$f_{\mathrm{S}}(\lambda^a t, \lambda^b h) = \lambda f_{\mathrm{S}}(t, h) \tag{8.2.15}$$

这正是 Widom 的标度假设. 这种从格点系统到集团系统的变换, 称为 **Kadanoff 变换**, 由于利用了标度不变假设, 所以 Kadanoff 理论只是一种和前面形式上不同的唯象理论而已.

现在利用 Kadanoff 变换来考虑系统的自旋–自旋关联函数. 首先, 格点系统的关联函数为

$$G(r, t) \equiv \langle (s_i - \langle s_i \rangle)(s_j - \langle s_j \rangle) \rangle = \langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle \tag{8.2.16}$$

其中, $r \equiv |\underline{r}_i - \underline{r}_j|$ 是两格点 i, j 的距离. 集团系统的关联函数为

$$G(r_L, t_L) \equiv \langle (S_I - \langle S_I \rangle)(S_J - \langle S_J \rangle) \rangle = \langle S_I S_J \rangle - \langle S_I \rangle \langle S_J \rangle \tag{8.2.17}$$

其中, $r_L \equiv |\underline{r}_I - \underline{r}_J|$ 是两集团 I, J 的距离. 注意到, 当从格点系统过渡到集团系统时, 原来的晶格常数 a_0 就过渡成新的晶格常数 La_0, 这相当于用增大 L 倍的尺子来量度. 所以以 a_0 为长度单位量度的距离 r 和以 La_0 为长度单位量度的同样两点之间的距离, 应有

$$r = L r_L \tag{8.2.18}$$

而关联长度的变换关系应为

$$\xi(r, t) = L \xi(r_L, t_L) \tag{8.2.19}$$

引进如下参量 $\mathfrak{L}$:

$$\mathfrak{L} S_I \equiv \frac{1}{L^d} \sum_{i \in I} s_i \tag{8.2.20}$$

故有

$$\begin{aligned} G(r_L, t_L) &= \frac{1}{\mathfrak{L}^2} \frac{1}{L^{2d}} \sum_{i \in I} \sum_{j \in J} (\langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle) \\ &= \frac{1}{\mathfrak{L}^2} G(r, t) \end{aligned} \tag{8.2.21}$$

再利用式 (8.2.18) 和式 (8.2.13) 可得

$$G\left(\frac{r}{L}, L^{y_t} t\right) = \frac{1}{\mathfrak{L}^2} G(r, t) \tag{8.2.22}$$

另外, 又从格点系统及集团系统的哈密顿看出, 有

$$-\mu_{\mathrm{B}} h \sum_i s_i = -\mu_{\mathrm{B}} h_L \sum_I S_I \tag{8.2.23}$$

所以, 利用式 (8.2.20) 及 $\sum\limits_{i}=\sum\limits_{I}\sum\limits_{i\in I}$, 上式为

$$-\mu_{\mathrm{B}}hL^{d}\mathfrak{L}\sum_{I}S_{I}=-\mu_{\mathrm{B}}h_{L}\sum_{I}S_{I} \tag{8.2.24}$$

故可取

$$h_{L}=L^{d}\mathfrak{L}h \tag{8.2.25}$$

对比式 (8.2.13), 得

$$\mathfrak{L}=L^{y_{h}-d} \tag{8.2.26}$$

从而式 (8.2.22) 可写成

$$G\left(\frac{r}{L},L^{y_{t}}t\right)=L^{2(d-y_{h})}G(r,t) \tag{8.2.27}$$

我们得到了自旋–自旋关联函数的标度关系, 它对任何 L 均成立. 在上式中取 $L=r$, 并利用式 (8.2.14a) 和式 (8.2.4) 可得

$$G(r,t)=r^{2(y_{h}-d)}G(1,r^{y_{t}}h)=r^{-2d/(1+\delta)}G(1,r^{d/[\beta(1+\delta)]}t) \tag{8.2.28}$$

取 $t=0$, 则有

$$G(r,0)=r^{-2d/(1+\delta)}G(1,0)$$

再利用 $G(r,0)\propto r^{-(d-2+\eta)}$, 可得

$$2-\eta=\frac{d(\delta-1)}{(\delta+1)} \tag{8.2.29}$$

又由式 (8.2.19), 并对于 $t>0$, 利用 $\xi(r,t)\propto t^{-\nu}$, $\xi(r_{L},t_{L})\propto t_{L}^{-\nu}=(L^{y_{t}}t)^{-\nu}$, 以及在临界点关联长度不改变的性质 (参见本章第三节) $t^{-\nu}=t_{L}^{-\nu}$, 可得

$$\nu=\frac{1}{y_{t}}=\frac{d}{\beta(1+\delta)} \tag{8.2.30}$$

还可以把式 (8.2.29) 和式 (8.2.30) 写成如下等价形式:

$$\nu(2-\eta)=\gamma\quad(\text{Fisher}) \tag{8.2.31}$$

$$2-\alpha=\nu d\quad(\text{Josephson}) \tag{8.2.32}$$

式 (8.2.32) 常被称为 “**超标度关系**”. 对于量子相变情形, 后面将证明超标度关系应该被修改成

$$2-\alpha=\nu(d+z) \tag{8.2.33}$$

其中, z 称为 "**动力学指数**"(dynamic exponent), 可以看到 $d+z$ 起到有效维数的作用. 由于满足四个标度关系, 在式 (8.1.1)∼ 式 (8.1.6) 中的六个临界指数中只有两个临界指数是独立的.

实验结果表明这些标度关系符合得很好, 而且某些不同物理体系, 不管它们是否有不同的晶格结构或是有不同的相互作用, 也不管它们是否属于不同的二级相变, 它们的临界指数却十分接近. 这表明, 对于临界行为, 某些共性起主导作用. 因而人们在总结实验资料的基础上, 提出了 "**普适性假设**": 只有两个量决定体系的临界行为, 即空间维数 d 和序参量维数 n, 具有相同 d 和 n 的体系属于同一个普适类, 它们有相同的临界指数, 即有相同的临界行为.

第三节　重整化群的一般理论

重整化群方法是一种应用广泛且强有力的理论工具, 它经常用在微扰论失效的领域. 重整化群有许多不同的形式体系, 它们已成功地应用于从经典力学到量子多粒子体系的大量种类的物理问题中. 但本节我们主要考虑重整化群应用于临界现象中的表述方式. 它给唯象的标度理论提供了坚实的数学基础, 并能为我们提供计算临界指数值的方法, 而这正是标度理论不能办到的.

重整化群 (RG)是重整化群变换的集合. 设体系的哈密顿为 $H(\boldsymbol{K})$, 它由一组相互作用参量或耦合常数 $\boldsymbol{K}=(K_1,K_2,\cdots)$ 指定. 重整化群变换是这样一个映射, 它把 $H(\boldsymbol{K})$ 映射成另一个哈密顿 $H(\boldsymbol{K}')$, 并且映射后的哈密顿和原来的哈密顿有相同的形式, 只不过有了一组新的耦合参量 $\boldsymbol{K}'=(K_1',K_2',\cdots)$ 而已. 这可形式地表达成

$$R\{H(\boldsymbol{K})\}=H(\boldsymbol{K}') \tag{8.3.1}$$

或者等价地表达成

$$R(\boldsymbol{K})=\boldsymbol{K}' \tag{8.3.2}$$

在实践中, 能够以多种多样的方式建立重整化群变换, 但非常依赖于所研究的问题. 在临界现象的应用中, 这种变换能在标度途径中生成. 例如, 在局域磁矩模型 (如 Ising 模型) 的实空间 (坐标空间) 标度途径中, 考虑增加长度标度的自旋集团 (spin block), 然后由生成的变换来寻找集团之间的相互作用是如何变化的, 要求集团之间的相互作用总能够 (至少近似地) 由同一形式的模型所描述. 然后在集团尺度趋于无穷大的极限下利用这些标度变换来导出临界指数. 这些变换本质上是实空间重整化群变换. 之所以要将集团尺度取无穷大极限是因为在临界现象中我们感兴趣的是体系的长程行为, 正是长程行为决定了体系的临界行为. 所以我们的目的应该是通过移除短程涨落来建立一个对更长的长度标度成立的有效理论. 也可以在

动量空间中来进行标度变换. 如果将短波长涨落(大动量涨落) 和长波长涨落(小动量涨落) 分别看成 “快” 模和 “慢” 模, 那么我们的目的也可以说成通过积掉快模来建立一个慢模的有效理论.

通常通过一个下标 (如 L) 来表征 RG 变换, 它指定了新的长度标度 (或新能标) 对旧标度的比值. 作一系列 RG 变换：

$$\boldsymbol{K}^{(1)}=R_L(\boldsymbol{K}),\quad \boldsymbol{K}^{(2)}=R_L(\boldsymbol{K}^{(1)}),\quad \boldsymbol{K}^{(3)}=R_L(\boldsymbol{K}^{(2)}),\ \cdots \tag{8.3.3}$$

就会在参量空间中形成一系列的点. 当 L 为连续变量时, 这些点形成参量空间中的一个轨迹. 我们如此构建 RG 变换使得满足

$$R_{L'}\left\{R_L(\boldsymbol{K})\right\}=R_{LL'}(\boldsymbol{K}) \tag{8.3.4}$$

除了封闭性, 变换之间的结合律、交换律显然成立并且也有恒同变换 (单位元). 由于变换总是按增加长度标度 (空间的粗粒化) 或能标的减小来进行的, 所以不存在逆变换. 故重整化群严格地说只是一个半群而不是一个群.

一个在 RG 变换下保持不变的点 $\boldsymbol{K}^*$ 叫**不动点**：

$$R_L(\boldsymbol{K}^*)=\boldsymbol{K}^* \tag{8.3.5}$$

在不动点的邻域, RG 变换反复应用所生成的轨迹的行为通常能够由在该邻域内的**线性化 RG 变换**来确定. 事实上, 设 $\boldsymbol{K}=\boldsymbol{K}^*+\delta\boldsymbol{K}$, 则

$$R_L(\boldsymbol{K})=R_L(\boldsymbol{K}^*+\delta\boldsymbol{K})=\boldsymbol{K}^*+L_L^*\delta\boldsymbol{K}+0(\delta\boldsymbol{K}^2) \tag{8.3.6}$$

其中, L_L^* 是线性变换, $(L_L^*)_{\alpha\beta}=\left.\dfrac{\partial(R_L)_\alpha}{\partial K_\beta}\right|_{K=K*}$. 令 L_L^* 的本征值和本征矢量分别为 $\lambda_\alpha^*(L),\boldsymbol{V}_\alpha^*(L)$：

$$L_L^*\boldsymbol{V}_\alpha^*(L)=\lambda_\alpha^*(L)\boldsymbol{V}_\alpha^*(L) \tag{8.3.7}$$

若 $\boldsymbol{V}_\alpha^*(L)$ 是完备的, 则可用它们作为表示 $\delta\boldsymbol{K}$ 的基底：

$$\delta\boldsymbol{K}=\sum_\alpha\delta K_\alpha\boldsymbol{V}_\alpha^*(\mu) \tag{8.3.8}$$

其中, δK_α 是 $\delta\boldsymbol{K}$ 的分量. 这样有

$$\begin{aligned}\boldsymbol{K}_L=R_L(\boldsymbol{K})&=\boldsymbol{K}^*+L_L^*\sum_\alpha\delta K_\alpha\boldsymbol{V}_\alpha^*(L)\\&=\boldsymbol{K}^*+\sum_\alpha\delta K_\alpha\lambda_\alpha^*\boldsymbol{V}_\alpha^*(L)\end{aligned}$$

即

$$\delta \boldsymbol{K}_L = \boldsymbol{K}_L - \boldsymbol{K}^* = \sum_{\alpha} \delta K_\alpha \lambda_\alpha^* \boldsymbol{V}_\alpha^*(L) \tag{8.3.8 a}$$

在特定不动点区域, 点在轨迹上的移动方向有赖于本征值 $\lambda_\alpha^*(L)$. 在 $\boldsymbol{K}^*$ 的邻域的点 $\boldsymbol{K}$ 上作用 n 次变换, 则只要变换生成的点仍在不动点的邻域内使得线性变换 (8.3.8) 成立, 就有

$$R_L^n(\boldsymbol{K}) = R_L^n(\boldsymbol{K}^* + \delta \boldsymbol{K}) = \boldsymbol{K}^* + \sum_{\alpha} \delta K_\alpha \lambda_\alpha^{*n}(L) \boldsymbol{V}_\alpha^*(L) \tag{8.3.9}$$

我们把满足 $\lambda_\alpha^* > 1$ 的本征值称为**相关本征值,** 此时在式 (8.3.9) 中, $\delta\boldsymbol{K}$ 对应的分量随 m 增加, 满足 $\lambda_\alpha^* < 1$ 的本征值称为**无关本征值**, 此时 $\delta\boldsymbol{K}$ 对应的分量随 m 减小. 满足 $\lambda_\alpha^* = 1$ 的本征值称为**边缘本征值**, 它们对应的本征矢量也可以类似地命名. 可以用这些本征值来判断不动点的类型.

仅有无关本征值的不动点称为 “**稳定不动点**”. 由式 (8.3.9) 知, 随 n 增加 $\delta\boldsymbol{K} \to 0$, 在该不动点的邻域中, 轨迹将趋向于不动点. 若存在一个或多个相关本征值, 则不动点是 “**不稳定不动点**”. 轨迹将驱离不动点, 其离开的方向主要由最大相关本征矢量来决定. 图 8.3.1(a) 和 (b) 中的不动点分别是稳定不动点和不稳定不动点. 其中, (b) 中有一个相关本征矢量.

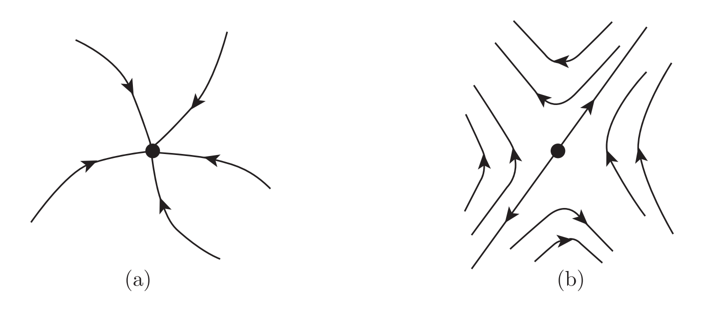


图 8.3.1　稳定不动点和不稳定不动点

若不动点没有相关本征值且至少有一个边缘本征值, 则称为 “**边缘不动点**”. 在边缘不动点邻域中轨迹的行为不能只从线性化形式 (8.3.8) 和 (8.3.9) 来确定, 非线性修正必须加以考虑.

现在我们来了解临界点与不动点之间的关系. 在临界点附近, 关联长度 ξ 是很大的有限值. 当长度标度从 a 增加到 $La(L > 1)$ 时, 从新的长度单位来衡量, 关联长度就缩小至原来的 $\dfrac{1}{L}$, 即

$$\xi(\boldsymbol{K}') = \xi(R_L(\boldsymbol{K})) = \frac{1}{L}\xi(\boldsymbol{K}) \tag{8.3.10}$$

由于当体系严格处于临界点时 (即 $\boldsymbol{K}=\boldsymbol{K}_{\mathrm{C}}$ 时), 关联长度为无穷, 即

$$\xi(\boldsymbol{K}_{\mathrm{C}})=\infty \tag{8.3.11}$$

所以由式 (8.3.10) 有

$$\xi\left(R_L(\boldsymbol{K}_{\mathrm{C}})\right)=\frac{1}{L}\xi(\boldsymbol{K}_{\mathrm{C}})=\infty$$

将上式与式 (8.3.11) 对比可知

$$R_L(\boldsymbol{K}_{\mathrm{C}})=\boldsymbol{K}_{\mathrm{C}} \tag{8.3.12}$$

这说明临界点是变换 R_L 的不动点. 另外, 由于在临界点附近, 在 RG 变换下关联长度会变小, 而关联长度变小意味着体系的实际状态离临界状态越远. 因而在某个不动点 $\boldsymbol{K}^*$ 附近任取一点 $\boldsymbol{K}$, 然后对它作多次 RG 变换, 得到一系列点 $\boldsymbol{K}^{(1)}$, $\boldsymbol{K}^{(2)}$, $\cdots$ 若这些点离不动点 $\boldsymbol{K}^*$ 越来越远, 即关联长度越来越小, 说明系统的状态离临界状态越来越远, 由此推断 $\boldsymbol{K}^*$ 是临界点. 这样我们得到重要结论：临界点 $\boldsymbol{K}_{\mathrm{C}}$ 是参数空间中 **RG 变换的不稳定不动点**.

一旦找到临界点, 我们就可以借助于临界点邻域中的线性化 RG 变换来求出标度幂, 进而求出各种临界指数. 为此我们可以利用 Widom 标度假设和自由能密度 f_{S}. 为具体起见, 仍考虑铁磁相变, 设体系只有两个耦合参数 $\boldsymbol{K}=(t,h)$. 现在考察临界点 $\boldsymbol{K}_{\mathrm{C}}$ 的邻域内两个点 $\boldsymbol{K}$ 和 $\boldsymbol{K}_L=R_L(\boldsymbol{K})$ 的关系. 由式 (8.3.8) 知

$$\delta\boldsymbol{K}=\delta t\boldsymbol{V}_1^*(L)+\delta h\boldsymbol{V}_2^*(L) \tag{8.3.13}$$

又由式 (8.3.8a) 知

$$\begin{aligned}\delta\boldsymbol{K}_L&=\delta t_L\boldsymbol{V}_1^*(L)+\delta h_L\boldsymbol{V}_2^*(L)\\&=\delta t\lambda_t^*\boldsymbol{V}_1^*(L)+\delta h\lambda_h^*\boldsymbol{V}_2^*(L)\end{aligned} \tag{8.3.14}$$

用 δt 和 δh 作为变量代入式 (8.2.12), 得

$$f_{\mathrm{S}}(\delta t,\delta h)=L^{-d}f_{\mathrm{S}}(\lambda_t^*\delta t,\lambda_h^*\delta h) \tag{8.3.15}$$

将此式与 Widom 标度假设式 (8.2.15) 比较, 可以令 $t\to\delta t$, $h\to\delta h$, 并令 $\lambda=L^d$, $\lambda^a=\lambda_t^*$, $\lambda^b=\lambda_h^*$, 则得到标度幂：

$$a=\frac{\ln\lambda_t^*}{d\ln L},\quad b=\frac{\ln\lambda_h^*}{d\ln L} \tag{8.3.16}$$

所以问题就归结为求线性化 RG 变换的本征值. 一旦求出了标度幂, 就可以用本章第二节中的公式求出临界指数 $\alpha,\beta,\gamma,\delta,\eta$ 和 ν.

下面我们进行一些讨论：

(1) 在某些情形, 分析 RG 变换方程的行为时, 通过取 $L = \mathrm{e}^{\ell}$ 来将 RG 方程表达成微分形式是方便的, 其中 $\ell = \ln L$ 是 RG 步骤的控制参量. 设 ℓ 是无穷小量, 则人们能够使得重整化耦合常数和原来的耦合常数之间的差为任意小. 这样可以将 $\boldsymbol{K}' - \boldsymbol{K} = R_L(\boldsymbol{K}) - \boldsymbol{K}$ 表达成所谓的 **Gell-Mann Low 方程**的形式：

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{K}}{\mathrm{d}\ell} = R^{\ell}(\boldsymbol{K}) \tag{8.3.17}$$

出于历史原因, 方程的右端被称为 (广义)β- **函数**, 它被定义为

$$R^{\ell}(\boldsymbol{K}) = \lim_{\ell \to 0} \frac{R_L(\boldsymbol{K}) - \boldsymbol{K}}{\ell} \tag{8.3.18}$$

由式 (8.3.5) 知, 不动点 $\boldsymbol{K}^*$ 满足

$$R^{\ell}(\boldsymbol{K}^*) = 0 \tag{8.3.19}$$

设 $R^{\ell}(\boldsymbol{K})$ 的线性化矩阵为 W, $W_{\alpha\beta} = \left.\dfrac{\partial R^{\ell}_{\alpha}}{\partial K_{\beta}}\right|_{K=K*}$, 则

$$R^{\ell}(\boldsymbol{K}) = R^{\ell}(\boldsymbol{K}^* + \delta\boldsymbol{K}) \simeq W\delta\boldsymbol{K} \tag{8.3.20}$$

设 W 的本征值和本征矢量分别为 $\lambda^{(\ell)}_{\alpha}$ 和 $\boldsymbol{u}_{\alpha}$, 即

$$W\boldsymbol{u}_{\alpha} = \lambda^{(\ell)}_{\alpha}\boldsymbol{u}_{\alpha} \tag{8.3.21}$$

若 $\boldsymbol{u}_{\alpha}$ 是完备的, 则

$$\boldsymbol{K} - \boldsymbol{K}^* = \sum_{\alpha} \delta K_{\alpha}\boldsymbol{u}_{\alpha} \tag{8.3.22}$$

故

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\ell}(\boldsymbol{K} - \boldsymbol{K}^*) = \sum_{\alpha} \frac{\mathrm{d}(\delta K_{\alpha})}{\mathrm{d}\ell}\boldsymbol{u}_{\alpha} \tag{8.3.23}$$

另外, 有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\ell}(\boldsymbol{K} - \boldsymbol{K}^*) = W(\boldsymbol{K} - \boldsymbol{K}^*) = \sum_{\alpha} \lambda^{(\ell)}_{\alpha}\delta K_{\alpha}\boldsymbol{u}_{\alpha}$$

所以

$$\frac{\mathrm{d}(\delta K_{\alpha})}{\mathrm{d}\ell} = \lambda^{(\ell)}_{\alpha}\delta K_{\alpha} \tag{8.3.24}$$

这样我们得到如下标度关系：

$$\delta K_{\alpha}(\ell) = \delta K_{\alpha}(0)\mathrm{e}^{\ell\lambda^{(\ell)}_{\alpha}} \tag{8.3.25}$$

由此看出 $\lambda_\alpha^{(\ell)} > 0$ 时是相关的, $\lambda_\alpha^{(\ell)} < 0$ 时是无关的, $\lambda_\alpha^{(\ell)} = 0$ 时是边缘的.

同样将式 (8.3.25) 应用于有两个耦合常数 $\boldsymbol{K} = (t, h)$ 的铁磁体系, 则有

$$f_{\rm S}(\delta t, \delta h) = L^{-d} f_{\rm S}({\rm e}^{\ell y_t}\delta t, {\rm e}^{\ell y_h}\delta h) \tag{8.3.26}$$

其中, y_t, y_h 分别为线性化矩阵 W 的两个本征值, 显然它们与式 (8.2.14) 中所定义的 y_t, y_h 相一致, 即

$$a = \frac{y_t}{d}, \quad b = \frac{y_h}{d} \tag{8.3.27}$$

借助于标度幂 a, b. 我们可将临界指数与本征值 y_t, y_h 的关系表述如下：

$$\alpha = 2 - \frac{d}{y_t}, \quad \beta = \frac{d - y_h}{y_t}, \quad \gamma = \frac{2y_h - d}{y_t} \tag{8.3.28}$$

$$\delta = \frac{y_h}{d - y_h}, \quad \nu = \frac{1}{y_t}, \quad \eta = 2 + d - 2y_h \tag{8.3.29}$$

(2) 虽然前面的讨论是以有两个耦合常数的铁磁体系为例, 但推广到有不止两个耦合参数的体系却是直接的. 为了求得临界指数, 同样要考察 R_L 在不动点邻域中的变换性质, 同样可将 R_L 或 $R^{(\ell)}$ 在临界点邻域中加以线性化, 并求 D 维线性化矩阵的本征值 $\lambda_1^*, \lambda_2^*, \cdots, \lambda_D^*$(或 $\lambda_1^{(\ell)}, \lambda_2^{(\ell)}, \cdots, \lambda_D^{(\ell)}$), 并利用其中相关本征值来确定标度幂及临界指数.

第四节　实空间重整化群

一、集团方法

实空间重整化群也称为坐标空间重整化群. 虽然实空间重整化群已有几种表述形式, 但这里我们将采用集团方法(block method) 来加以讨论. 该方法已被用来研究强关联体系的不同问题.

实空间重整化群的优点在于, 首先它是贯彻标度变换思想的最直接方式, 因而更易于理解和接收；其次, 这个方法无需费太大的力气就能给出不同相的吸引不动点, 这是很有用的, 因为相变的性质能够通过在相的吸引子上计算出的指数所确定. 然而与后面要讨论的动量空间重整化群相比较, 它的缺点在于, 对它所得到的计算结果进行系统改进时却难于解析地执行, 因而更加难于把控.

集团方法实际执行时相当自由, 但所有方法都会含有如下步骤：①划分集团；②找出 RG 变换；③确定 RG 变换下的不动点；④确定临界点并分析临界行为 (或计算临界指数). 除此之外, 在第一步和第二步之间可以根据问题的特殊性来设计特定的程序步骤, 通常含有对集团内的自由度求所谓**部分迹**, 这正是前面所说 “移除短程涨落” 的某种体现.

作为一个例子, 对一维 **Ising 模型**作 RG 分析, 其哈密顿为

$$H = -J\sum_{i=1}^{N} S_i S_{i+1} - h\sum_{i=1}^{N} S_i \tag{8.4.1}$$

其中, $S_i = \pm 1$ 代表格位 i 的自旋, 它满足周期性边界条件 $S_{N+1} = S_1$; h 代表外磁场; J 是耦合常数.

现在将自旋链划分成由 $L=2$ 个相邻格点组成的集团, 原来的自旋链就由 $N/2$ 个自旋集团组成, 如图 8.4.1 所示. 在每个集团内总有一个奇数格位 (用 “•” 表示) 和一个偶数格位 (用 “×” 表示).

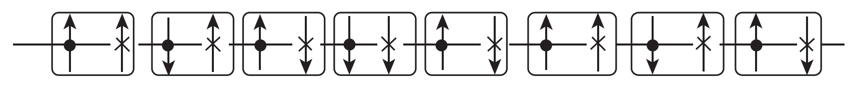


图 8.4.1　自旋链的划分 ($L=2$)

我们规定奇数格位上的自旋作为集团的自旋变量. 为了使集团自旋的描述与原来的格点自旋描述完全等价, 必须引入 “内部自由度”. 这里我们将偶数格位上的自旋视为内部自由度, 然后对内部自由度求迹 (即部分迹), 从而达到消去偶数格位自旋的目的. 这种通过选择性求和, 消去某些自旋变量的方法被称为抽选法 (decimation).

对偶数格位之一的 S_2 的求迹的情况如下：

$$\begin{aligned}\operatorname*{tr}_{S_2} \mathrm{e}^{\beta J S_2(S_1+S_3)+\beta h S_2} &= \mathrm{e}^{\beta J(S_1+S_3)}\mathrm{e}^{\beta h} + \mathrm{e}^{-\beta J(S_1+S_3)}\mathrm{e}^{-\beta h} \\ &= \varDelta \mathrm{e}^{\beta J' S_1 S_3 + \beta h''(S_1+S_3)}\end{aligned} \tag{8.4.2}$$

其中, $\varDelta$ 是与自旋无关的常数；J' 是待定的重整化耦合常数；h'' 是待定的重整化外场. 在式 (8.4.2) 中取 $S_1 = S_3 = 1$, 可得

$$\mathrm{e}^{\beta(2J+h)} + \mathrm{e}^{-\beta(2J+h)} = \varDelta \mathrm{e}^{\beta J' + 2\beta h''} \tag{8.4.3}$$

取 $S_1 = S_3 = -1$, 可得

$$\mathrm{e}^{\beta(2J-h)} + \mathrm{e}^{-\beta(2J-h)} = \varDelta \mathrm{e}^{\beta J' - 2\beta h''} \tag{8.4.4}$$

取 $S_1 = -S_3 = -1$, 可得

$$\mathrm{e}^{\beta h} + \mathrm{e}^{-\beta h} = \varDelta \mathrm{e}^{-\beta J'} \tag{8.4.5}$$

求解式 (8.3.30)~ 式 (8.3.32), 得到解为

$$\varDelta^2 = 4\mathrm{ch}(\beta h)\left\{\mathrm{ch}[\beta(2J+h)]\mathrm{ch}[\beta(2J-h)]\right\}^{1/2} \tag{8.4.6}$$

$$h'' = \frac{1}{4\beta}\left\{\frac{\mathrm{ch}[\beta(2J+h)]}{\mathrm{ch}[\beta(2J-h)]}\right\} \tag{8.4.7}$$

$$J' = \frac{1}{4\beta}\ln\left\{\frac{\mathrm{ch}[\beta(2J+h)]\mathrm{ch}[\beta(2J-h)]}{\mathrm{ch}^2(\beta h)}\right\} \tag{8.4.8}$$

由式 (8.4.2) 可知, 体系的配分函数 $Z_N(J,h)$ 为

$$Z_N(J,h) = \mathrm{tr}\mathrm{e}^{-\beta H} = \varDelta^2 \sum_{\{S_i(i:\mathrm{odd})\}} \mathrm{e}^{\beta J'\sum\limits_i S_i S_{i+2} + \beta(h+2h'')S_i}$$

若令

$$h' = h + 2h'' = h + \frac{1}{2\beta}\ln\frac{\mathrm{ch}[\beta(2J+h)]}{\mathrm{ch}[\beta(2J-h)]} \tag{8.4.9}$$

则在略去一个与自旋无关的整体因子 $\varDelta^{N/2}$ 后, 集团自旋体系的配分函数就和原格点自旋体系的配分函数具有相同的函数形式:

$$Z_N(J,h) = Z_{N/2}(J',h') \tag{8.4.10}$$

(注意: 整体因子 $\varDelta^{N/2}$ 只是使体系的自由能获得一个无关紧要的可加性的整体常数 $\varDelta F \sim -\dfrac{N}{2\beta}\ln\varDelta$). 故式 (8.4.8) 和式 (8.4.9) 就是所需要的 RG 变换. 每经过一次变换, 长度标度就二倍于原来的体系, $L=2$.

下面我们来寻找不动点. 不动点方程为

$$J^* = \frac{1}{4\beta}\ln\left\{\frac{\mathrm{ch}[\beta(2J^*+h^*)]\mathrm{ch}[\beta(2J^*-h^*)]}{\mathrm{ch}^2(\beta h^*)}\right\} \tag{8.4.11}$$

$$h^* = h^* + \frac{1}{2\beta}\ln\frac{\mathrm{ch}[\beta(2J^*+h^*)]}{\mathrm{ch}[\beta(2J^*-h^*)]} \tag{8.4.12}$$

它们有如下两个解:

$$(J^*,h^*) = (0,h) \tag{8.4.13}$$

$$(J^*,h^*) = (\infty,0) \tag{8.4.14}$$

显然, 不动点 $(0,h)$ 对应于顺磁相; 而不动点 $(\infty,0)$ 对应于铁磁相. 为方便起见, 定义一组新变量 v,w:

$$v = \mathrm{th}(\beta J),\quad w = \mathrm{th}(\beta h) \tag{8.4.15}$$

则 RG 方程可写成如下较简单的形式:

$$\frac{1+w'}{1-w'} = \frac{(1+w)(1+2wv+v^2)}{(1-w)(1-2wv+v^2)} \tag{8.4.16}$$

$$\left(\frac{1+v'}{1-v'}\right)^2 = \frac{(1+v^2)^2 - 4v^2w^2}{1-v^2} \tag{8.4.17}$$

注意：由于 $(J,h) \to (v,w)$ 的变换是非奇异的, 即 $\det\left[\frac{\partial(v,w)}{\partial(J,h)}\right] \neq 0$, 故对于新的 RG 变换 (8.4.16) 和 (8.4.17) 及原来的 RG 变换 (8.4.8) 和 (8.4.9), 它们的线性化 RG 有相同的本征值 (参见附录 8A). RG 变换的不动点现在可写成

$$(v^*, w^*) = (0, w), \quad (v^*, w^*) = (1, 0) \tag{8.4.18}$$

为了讨论不动点的稳定性, 可以采用**迭代法**, 今以不动点 $(1,0)$ 为例来讨论. 在不动点附近任选一点作为初始点 (v_0, w_0), 代入式 (8.4.16) 和式 (8.4.17) 作 RG 变换, 得到点 (v_1, w_1), 再将 (v_1, w_1) 代入式 (8.4.16) 和式 (8.4.17) 作 RG 变换得到点 (v_2, w_2) 等. 这样可得点的序列. 在图 8.4.2 中, 由下向上的三条曲线分别对应了 $(0.9999, 0.01)$ 初始点、$(0.999, 0.01)$ 初始点和 $(0.99, 0.01)$ 初始点的情形.

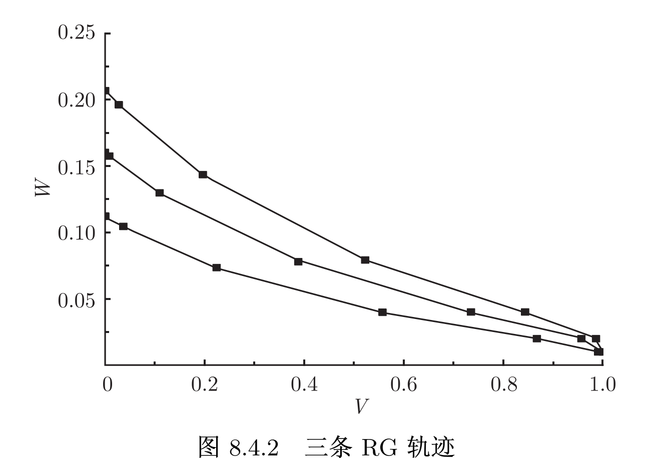


图 8.4.2　三条 RG 轨迹

从图 8.4.2 能够看出这个点的序列离不动点 $(1,0)$ 越来越远, 故不动点 $(1,0)$ 是一个不稳定的 (排斥性) 不动点, 它起着 “临界点” 的作用 (但这个点因对应绝对零度而是物理上不能到达的点). (若点的序列离不动点越来越近, 就成了稳定不动点). 类似可讨论不动点 $(0,w)$, 这是一个稳定的 (吸引性) 不动点. 由于 w 可以取任意常数, 这些不动点形成不动点线. 我们还可以用箭头标记耦合常数的流动方向, 从而得到明显的 “流向图”.

为了定量揭示体系在不动点附近的行为, 我们在不动点附近线性化 RG 变换.

在顺磁不动点 $(0,w)$ 附近, 在 v 的最低阶, 式 (8.4.16) 和式 (8.4.17) 成为

$$v' = v^2(1-w^2) \tag{8.4.19}$$

$$w' = w \tag{8.4.20}$$

其线性化 RG 变换矩阵为

$$\begin{pmatrix} \dfrac{\partial\nu'}{\partial\nu} & \dfrac{\partial\nu'}{\partial\omega} \\ \dfrac{\partial\omega'}{\partial\nu} & \dfrac{\partial\omega'}{\partial\omega} \end{pmatrix}_{\nu=0} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{8.4.21}$$

显然, 与温度参量 v 相对应的本征值 0 是无关本征值, 但与磁参量 w 相对应的本征值 1 却是边缘本征值, 这导致形成不动点构成的线而不是孤立不动点.

在排斥不动点 $(1,0)$ 附近, 令 $\nu = 1 - g\,(g \ll 1)$, 保留 g, ω 的最低阶, 式 (8.4.16) 和式 (8.4.17) 成为

$$g' = 2g \tag{8.4.22}$$

$$\omega' = 2\omega \tag{8.4.23}$$

该线性化 RG 变换的本征值都是 2, 因而都是相关本征值. 由式 (8.3.16) 知, 标度幂分别为

$$a = 1, \quad b = 1 \tag{8.4.24}$$

所以有

$$\alpha = 2 - \frac{1}{a} = 1, \quad \beta = \frac{1-b}{a} = 0, \quad \gamma = \frac{2b-1}{a} = 1 \tag{8.4.25}$$

$$\nu = \frac{1}{ad} = 1, \quad \eta = 2 + d(1-2b) = 1 \tag{8.4.26}$$

我们作如下一些讨论:

在上面对一维 Ising 模型的 RG 分析中, 我们选取了抽选法. 该方法也可推广应用于较高维模型. 和其他一些常用方法 (例如, 规定集团自旋采用 “多数法则” 的方法等) 相比较, 抽选法稍简单些, 但可能离 “空间粗粒化” 的物理思想稍远些.

有关更多 Ising 模型的 RG 分析参见文献 (Creswick R J, Farach H A, Pook C P. Introduction to Renormalization Group Methods in Physics. New York: Wiley, 1992).

二、弱局域化的标度行为

在扩散输运中的弱局域化的标度行为中, $d_c = 2$ 是一个临界维数, 我们可以用重整化群方法来描述其对维数的跨越行为. 这个方法是建立在局域化和连续相变中的临界现象之间的类比之上的, 其中局域化长度起着关联长度的作用 (后者表征关联区域的大小). 当接近临界点 T_c 时, 关联长度像 $(T - T_c)^{-\nu}$ 一样发散 (其中, ν 为临界指数, 它依赖于维数 d).

为了应用重整化群方法, 考虑一个 d 维中的边长 L 的各项同性超立方体, 使得其截面面积为 L^{d-1}, 欧姆定律可表达为

$$G_L = \sigma L^{d-2} \tag{8.4.27}$$

其中, G_L 为超立方体的电导. 这个欧姆定律标度对于 $G_L \gg G_\xi \equiv e^2/\hbar$ 成立. 在相反极限情形 ($G_L \ll G_\xi$ 时), 按照 Thouless 的集团–标度 (block-scaling) 论点, 弱局域化标度可表达为

$$G_L \propto G_\xi \mathrm{e}^{-L/\xi} \tag{8.4.28}$$

现在可应用重整化群观点. 为了达到一个不动点 (它是两个极限式 (8.4.27) 和式 (8.4.28) 之一), 可以接续实施重新标度：$L \to bL$(其中, 扩大参量 $b > 1$). 引入无量纲 "**Thouless 数**"

$$g(L) \equiv \frac{G_L}{G_\xi} \tag{8.4.29}$$

的对数作为迭代参量, 并定义**标度函数**:

$$\beta(g) \equiv \frac{\mathrm{d}\ln g(L)}{\mathrm{d}\ln L} \tag{8.4.30}$$

则由式 (8.4.27) 和式 (8.4.28) 可得

$$\beta(g) \simeq \begin{cases} d-2 & (\ln g \gg 1) \\ \ln g(L) & (\ln g \ll 1) \end{cases} \tag{8.4.31}$$

令 $t(L) \equiv \ln g(L)$, 则由式 (8.4.30) 可得**流方程**:

$$\beta(t) = L\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}L} \tag{8.4.32}$$

一旦知道了 $\beta(t)$, 我们可以对流方程进行积分, 得

$$t(bL) - t(L) = L\int_1^b \mathrm{d}b'\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}L}(b'L) = \int_1^b \mathrm{d}b'\beta(t) = (b-1)\beta(t) \tag{8.4.33}$$

这个方程给出了 t 的标度关系. 从方程 (8.4.32) 可以看出, 当 $\beta(t) > 0$ 时, $\Delta L = (b-1)L > 0$ 的膨胀产生的步长 $\Delta t > 0$. 定义 t_c 满足 $\beta(t_\mathrm{c}) = 0$(图 8.4.3), 则始于 $t_0 \equiv t(L_0) > t_\mathrm{c}$ 的迭代将导向金属不动点 $t = +\infty$, 而始于 $t_0 < t_\mathrm{c}$ 的迭代将导向绝缘体不动点 $t = -\infty$. 而 t_c 本身是一个不稳定不动点. 当 $d > 2$ 时, 在临界电导 $g = g_\mathrm{c}$ 处存在无序驱动的金属–绝缘体转变. 由图 8.4.3 还可以看到, 当 $d \leqslant 2$ 时, $\beta(g)$ 总是负的, 且仅存在绝缘体不动点, 电子总是局域的, 但这是在忽略了电子之间相互作用效应下的结果. 后来人们发现在异质结内的二维电子气似乎出现金属–绝缘体转变, 就可能来源于电子–电子相互作用效应.

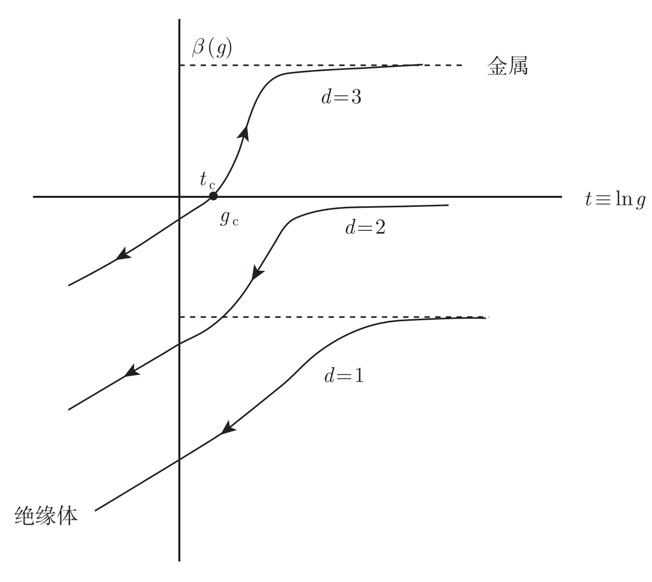


图 8.4.3　标度函数 $\beta(g)$

三、量子相变

量子相变不是由温度驱动的, 而是由描述体系基本相互作用的不同参量之间的竞争所驱动的. 我们用横向磁场中的 Ising 模型作为简单例子, 其哈密顿为

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}^{(\text{int})} = -h\sum_i \hat{S}_i^z - J\sum_i \hat{S}_i^x \hat{S}_{i+1}^x \tag{8.4.34}$$

其中, h 是横向磁场.

在量子相变中, 除了本章第一节中的六个经典指数 $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \nu, \eta$ 外, 我们还要引入一个所谓的动力学指数, 这是因为量子涨落不仅可以沿空间方向, 也可以沿时间方向.

设在零温临界点, 时间标度行为是

$$\tau' = L^z \tau \tag{8.4.35}$$

则指数 z 就叫**动力学指数**. 临界涨落的量子特性能把 z 与支配耦合常数 J 在临界点的标度的指数相联系. 设 J 的标度行为是

$$J' = L^{-y}J \text{ 从而 } h' = L^{-y}h \tag{8.4.36}$$

其中, h 和 J 有相同指数是因为在临界点有 $(h/J)' = h/J$. 令

$$g \equiv \left(\frac{h}{J}\right) - \left(\frac{h}{J}\right)_{\text{C}} \tag{8.4.37}$$

它量度了参数空间中与临界点的距离. 设其标度行为是

$$g' = L^a g \tag{8.4.38}$$

注意到耦合常数 J 有能量量纲, 在零温它是有效的能量标度来确定能量范围. 因此, 我们期待在零温时, 能量的涨落满足

$$\Delta E' = L^{-y} \Delta E$$

且

$$\Delta \tau' = L^z \Delta \tau$$

如果我们要求测不准关系 $\Delta E \Delta \tau \geqslant \hbar$ 是标度不变的, 那么

$$\Delta E' \Delta \tau' = L^{(z-y)} \Delta E \Delta \tau \geqslant \hbar \tag{8.4.39}$$

故必须有

$$y = z \tag{8.4.40}$$

从而知式 (8.4.36) 可以写成

$$J' = L^{-z} J, \quad h' = L^{-z} h \tag{8.4.41}$$

由于 J 是可以用来确定能量范围的有效的能量标度, 故由式 (8.4.34) 知, 在 $T = 0$ 时, 自由能密度可以写成如下形式：

$$f_{\mathrm{s}} = J \varphi(g) \tag{8.4.42}$$

其中, φ 是标度函数. 在标度变换下, 自由能密度以及关联长度有

$$f_{\mathrm{s}}' = J' \varphi(|g|') = L^d f_{\mathrm{s}} = L^d J \varphi(|g|) \tag{8.4.43}$$

$$\xi'(|g|') = L^{-1} \xi(|g|) \tag{8.4.44}$$

首先对于关联函数, 有

$$\xi(|g|) = L \xi'(|g|') = L \xi'(L^a |g|) \tag{8.4.45}$$

因 L 是任意的, 故可以取

$$L^a |g| = 1 \tag{8.4.46}$$

则

$$L = |g|^{-1/a} \tag{8.4.47}$$

故

$$\xi = |g|^{-1/a}\xi'(1)$$

再由式 (8.1.4) 知, 临界指数 ν 为

$$\nu = 1/a \tag{8.4.48}$$

由式 (8.4.43) 知

$$\frac{f_\mathrm{s}}{J} = \frac{L^{-d}f'_\mathrm{s}}{J} = \frac{L^{-d}J'\varphi(|g|')}{J} = L^{-(d+z)}\varphi(L^a|g|) \tag{8.4.49}$$

利用式 (8.4.46), 得

$$\frac{f_\mathrm{s}}{J} = |g|^{(d+z)/a}\varphi(1) \tag{8.4.50}$$

所以由式 (8.1.1) 知

$$2-\alpha = \nu(d+z) \tag{8.4.51}$$

这正是式 (8.2.33) 的结果. 由此知有效维数为

$$d_\mathrm{eff} = d+z \tag{8.4.52}$$

而式 (8.1.6) 中的序参量关联函数 $G(r)$ 也要相应地修改成

$$G(r) \propto \frac{1}{r^{(d+z)-2+\eta}} \tag{8.4.53}$$

现在我们来计算横向磁场中的 Ising 模型的动力学指数.

按照集团方法, 应首先划分集团. 这里我们仍然将自旋链按照由两个相邻格点自旋组成的集团来划分. 集团的哈密顿则为

$$\hat{H}_{12} = -h\left(\hat{S}_1^z + \hat{S}_2^z\right) - J\hat{S}_1^x\hat{S}_2^x \tag{8.4.54}$$

Ising 自旋的标准基底为 $\{|+\rangle, |-\rangle\}$:

$$\hat{S}^z|+\rangle = |+\rangle, \quad \hat{S}^z|-\rangle = -|-\rangle \tag{8.4.55}$$

在标准基底中, $\hat{S}^z$ 和 $\hat{S}^x$ 的矩阵表示为

$$\hat{S}^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{8.4.56}$$

对于两个格点自旋所构成的集团, 它的无耦合表象为 $\{|\varepsilon_1,\varepsilon_2\rangle\}$(其中, $\varepsilon_1,\varepsilon_2=+$ 或 $-$). 对于这种表象, 集团的哈密顿的矩阵表示为

$$\hat{H}_{12}=-J\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\otimes\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}-h\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\otimes\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$$

$$-h\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}\otimes\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-2h&0&0&-J\\0&0&-J&0\\0&-J&0&0\\-J&0&0&2h\end{pmatrix}\quad(8.4.57)$$

对该矩阵对角化, 可得到 $\hat{H}_{12}$ 的如下本征值和归一化本征矢量:

$$\varepsilon_1=-\sqrt{4h^2+J^2},\quad |1\rangle=\frac{1}{\sqrt{\alpha^2+1}}\left(\alpha|+,+\rangle+|-,-\rangle\right)\quad(8.4.58)$$

$$\varepsilon_2=-J,\quad |2\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+,-\rangle+|-,+\rangle\right)\quad(8.4.59)$$

$$\varepsilon_3=J,\quad |3\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+,-\rangle-|-,+\rangle\right)\quad(8.4.60)$$

$$\varepsilon_4=\sqrt{4h^2+J^2},\quad |4\rangle=\frac{1}{\sqrt{\beta^2+1}}\left(\beta|+,+\rangle+|-,-\rangle\right)\quad(8.4.61)$$

其中

$$\alpha=\frac{J}{\sqrt{4h^2+J^2}-2h},\quad \beta=\frac{-J}{\sqrt{4h^2+J^2}+2h}\quad(8.4.62)$$

现在我们规定两个能量较低的状态 $|1\rangle$ 和 $|2\rangle$ 作为集团有效自旋 $S'=\pm1$ 所对应的状态, 即

$$|+'\rangle\equiv|1\rangle,\quad |-'\rangle\equiv|2\rangle\quad(8.4.63)$$

当集团自旋用有效自旋来表示后, 则集团的哈密顿为

$$\hat{H}^{(0)'}=\varepsilon_1|+'\rangle\langle+'|+\varepsilon_2|-'\rangle\langle-'|\equiv-h'\hat{S}^{z'}+C'\quad(8.4.64)$$

由于

$$\hat{H}_{12}^{(0)'}|+'\rangle=\varepsilon_1|+'\rangle,\quad \hat{H}_{12}^{(0)'}|-'\rangle=\varepsilon_2|-'\rangle\quad(8.4.65)$$

$$\hat{S}^{z'}|+'\rangle=|+'\rangle,\quad \hat{S}^{z'}|-'\rangle=-|-'\rangle\quad(8.4.66)$$

所以有

$$C'=\frac{1}{2}(\varepsilon_1+\varepsilon_2)=\frac{1}{2}\left(\sqrt{4h^2+J^2}+J\right)\quad(8.4.67)$$

$$h' = \frac{1}{2}(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) = \frac{1}{2}\left(\sqrt{4h^2 + J^2} - J\right) \tag{8.4.68}$$

为了使集团自旋的描述与原来的格点自旋描述完全等价, 需要计算集团之间的耦合常数 J'. 设

$$\hat{S}_i^x = \chi \hat{S}'^x_{i,i+1} \tag{8.4.69}$$

其中, $i = 1$. 由

$$\langle +'|\hat{S}_i^x|-'\rangle = \langle +'|\hat{S}'^x_{12}|-'\rangle = \chi \tag{8.4.70}$$

可得

$$\chi = \frac{1+\alpha}{\sqrt{2(1+\alpha^2)}}$$

式 (8.4.69) 对于任意集团 $(i, i+1)$ 均成立. 定义集团 $(1,2),(3,4)$ 之间的耦合常数为 J', 满足

$$J'\hat{S}_{12}^x\hat{S}_{34}^x = J\hat{S}_2^x\hat{S}_3^x \tag{8.4.71}$$

故

$$J' = J\chi^2 = \frac{J(1+\alpha)^2}{2(1+\alpha^2)} \tag{8.4.72}$$

式 (8.4.68) 和式 (8.4.72) 给出了重整化群变换. 令 $x \equiv h/J$, 则 RG 方程可用如下方程给出:

$$x' = \frac{2\left(\sqrt{1+4x^2} - 1\right)\left(1 + 4x^2 - 2x\sqrt{1+4x^2}\right)}{\left(1 + \sqrt{1+4x^2} - 2x\right)^2} \tag{8.4.73}$$

现在我们来找不动点 x_*, 不动点方程为

$$24x_*^3 + 4x_*^2 + 6x_* + 2 - 2(1+4x_*^2)^{3/2} - (4x_*^2 + 2x_*)\sqrt{1+4x_*^2} = 0 \tag{8.4.74}$$

易验证 $x_* = 0, x_* = \infty$ 是两个稳定不动点, 其中, $x_* = 0$ 为有序相的吸引子, 而 $x_* = \infty$ 为无序相的吸引子. 式 (8.4.74) 还有一个非平庸的数值解 $x_{\mathrm{C}} = 1.2767$, 这是一个不稳定不动点, 是从 $\langle \hat{S}_z \rangle \neq 0$ 的长程有序磁相到无序相的 “量子临界点”. 由式 (8.4.38) 知, 在临界点附近, 有

$$\delta x' = L^a \delta x = \left.\frac{\partial x'}{\partial x}\right|_{x=x_{\mathrm{C}}} \delta x \tag{8.4.75}$$

所以有

$$\nu = \frac{1}{a} = \frac{\ln L}{\ln\left(\partial x'/\partial x\right)_{x=x_{\mathrm{C}}}} \approx 1.47 \tag{8.4.76}$$

又由式 (8.4.72) 和式 (8.4.41) 知

$$z = -\frac{\ln \varphi(x_{\mathrm{C}})}{\ln L} \approx 0.551 \tag{8.4.77}$$

其中

$$\varphi(x) = \frac{\left[1 - 2x + \sqrt{1+4x^2}\,\right]^2}{4\left(1 + 4x^2 - 2x\sqrt{1+4x^2}\right)}$$

注意: 这里所得到的值与精确解 $z = 1, \nu = 1$(参见 Pfeuty P. Ann. Phys., 1970, 57: 79) 有一定的差距, 原因在于所选集团太小 ($L = 2$), 如果将 L 取更大值来计算, 结果将得到改善.

第五节　自旋模型的连续场论表述

为了在动量空间实施 RG 变换, 我们首先把由分离的自旋变量构成的配分函数表述成对一组连续场的积分, 其次还从平均场论 (MFT) 的途径来讨论模型的临界行为. 这是因为尽管平均场论的结果往往与实际相距较远, 但它能对相变提供一个较为全面及相当直接的描述, 且它对相图的刻画比较好, 所以在一个新相变研究的前期工作通常就是去构建一个恰当的平均场论以便得到相图的一个大致的整体图像.

考虑如下一个推广的 Ising 模型, 其配分函数为

$$Z = \mathrm{tr}\mathrm{e}^{\frac{\beta}{2}\sum\limits_{ij} S_i J_{ij} S_j} \tag{8.5.1}$$

其中, 自旋之间的相互作用已扩展到任意自旋对. 若体系有平移对称性, 则 $J_{ij} = J_{i-j}$. 虽然 S_i 是只取分离值 ± 1 的自旋变量, 但可以将配分函数用一组连续 (辅助) 场 φ_i 的高斯型积分来表示 (参见附录 7.1A 中式 (7A.1.24)). 因

$$\mathrm{e}^{\frac{\beta}{2}\sum\limits_{ij} S_i J_{ij} S_j} = N\int \prod_i \frac{\mathrm{d}\varphi_i}{\sqrt{2\pi}} \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\sum\limits_{ij}\varphi_i(\beta J)^{-1}_{ij} + \sum\limits_i S_i\varphi_i} \tag{8.5.2}$$

其中, $N = [\det(\beta J)]^{-1/2}$. 对自旋变量 S_i 求迹, 并令 $\displaystyle\int \mathfrak{D}\varphi \equiv N\int\prod_i \frac{\mathrm{d}\varphi_i}{\sqrt{2\pi}}$, 则有

$$Z = \int \mathfrak{D}\varphi \exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{ij}\varphi_i(\beta J)^{-1}_{ij}\varphi_j + \sum_i \ln(2\mathrm{ch}\varphi_i)\right] \tag{8.5.3}$$

现在 Z 中已无自旋变量, 原来的 Ising 模型由一个等价的连续场论所代替. 我们运用稳相近似方法于积分式 (8.5.3), 令其中的指数为 A, 则由稳相条件 $\delta A/\delta\varphi_i = 0$

可得平均场方程:

$$\sum_j (\beta J)^{-1}_{ij}\varphi^0_j - \text{th}(\varphi^0_i) = 0 \tag{8.5.4}$$

其中, φ^0_i 是稳相条件的解. 进一步令 $\delta\varphi_i \equiv \varphi_i - \varphi^0_i$, 在 A 的展开式中仅保留到涨落的二阶项 (其一阶项由于稳相条件而为零), 得

$$Z = Z_0 \int \mathfrak{D}[\delta\varphi] \exp\left\{-\frac{1}{2}\sum_{ij}\delta\varphi_i\left[(\beta J)^{-1}_{ij} - \delta_{ij}\left(1-\text{th}^2(\varphi^0_i)\right)\right]\delta\varphi_j\right\} \tag{8.5.5}$$

其中

$$Z_0 = \exp\left\{-\frac{1}{2}\sum_{ij}\varphi^0_i \text{th}\left(\varphi^0_i\right) + \sum_i \ln\left[2\text{ch}(\varphi^0_i)\right]\right\} \tag{8.5.6}$$

当体系具有平移对称性时, 场 φ_i 与格位 i 无关, 故可以记为 φ^0, 稳相条件式 (8.5.4) 则成为

$$\varphi^0 = \beta J z \text{th}(\varphi^0) \tag{8.5.7}$$

其中, z 为配位数.

场 φ_i 和 J_{ij} 的傅里叶变换分别为

$$\delta\varphi_i = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\underline{q}} \text{e}^{\text{i}\underline{q}\cdot\underline{x}_i}\delta\varphi_{\underline{q}} \tag{8.5.8}$$

$$J(\underline{q}) = \sum_{i-j} \text{e}^{-\text{i}\underline{q}\cdot(\underline{x}_i-\underline{x}_j)} J_{i-j} \tag{8.5.9}$$

令

$$G^{-1}_{ij} \equiv (\beta J)^{-1}_{i-j} - \delta_{ij}(1-\text{th}^2(\varphi^0_i)) \tag{8.5.10}$$

则式 (8.5.5) 中的指数为

$$\begin{aligned}
-\frac{1}{2}\sum_{i,j}\delta\varphi_i G^{-1}_{ij}\delta\varphi_j &= -\frac{1}{2N}\sum_{\underline{q},\underline{q}'}\delta\varphi_{\underline{q}}\delta\varphi_{-\underline{q}}\sum_i \text{e}^{\text{i}(\underline{q}+\underline{q}')\cdot\underline{x}_i} \\
&\quad\times\left[\sum_{i-j}(\beta J)^{-1}_{i-j}\text{e}^{-\text{i}\underline{q}'\cdot(\underline{x}_i-\underline{x}_j)} - \sum_j \delta_{ij}(1-\text{th}^2(\varphi^0_i))\text{e}^{-\text{i}\underline{q}'\cdot(\underline{x}_i-\underline{x}_j)}\right] \\
&= -\frac{1}{2}\sum_{\underline{q}}\delta\varphi_{\underline{q}}\delta\varphi_{-\underline{q}}\left\{\left[\beta J(\underline{q})\right]^{-1} - [1-\text{th}^2(\varphi^0_i)]\right\} \\
&= -\frac{1}{2}\sum_{\underline{q}}\delta\varphi_{\underline{q}} G^{-1}(\underline{q})\delta\varphi_{-\underline{q}}
\end{aligned}$$

其中

$$G^{-1}(\underline{q}) = \left[\beta J(\underline{q})\right]^{-1} - [1 - \text{th}^2(\varphi_i^0)] \tag{8.5.11}$$

故

$$Z = Z_0 \int \mathfrak{D}[\delta\varphi] \exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{\underline{q}} \delta\varphi_{\underline{q}} G^{-1}(\underline{q}) \delta\varphi_{-\underline{q}}\right] \tag{8.5.12}$$

可以证明 $G(\underline{q})$ 是 φ-φ 关联函数:

$$G(\underline{q}) \sim \langle \varphi_{\underline{q}} \varphi_{-\underline{q}} \rangle \tag{8.5.13}$$

其中的平均是由式 (8.5.12) 中的高斯型权重因子决定的.

证明　给式 (8.5.12) 的配分函数加上源项, 令

$$Z[\eta] = Z_0 \int \mathfrak{D}[\varphi] \exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{\underline{q}} \varphi_{\underline{q}} G^{-1}(\underline{q}) \varphi_{-\underline{q}} + \sum_{\underline{q}} \eta_{-\underline{q}} \varphi_{\underline{q}}\right] \tag{8.5.14}$$

则

$$Z[\eta] \sim \mathrm{e}^{\frac{1}{2}\sum\limits_{\underline{q}} \eta_q G(\underline{q}) \eta_{-\underline{q}}} \tag{8.5.15}$$

由式 (8.5.14) 知

$$\left.\frac{\partial^2 Z}{\partial \eta_{\underline{q}} \partial \eta_{-\underline{q}}}\right|_{\eta=0} = Z_0 \int \mathfrak{D}[\varphi] \exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{\underline{q}} \varphi_{\underline{q}} G^{-1}(\underline{q}) \varphi_{-\underline{q}}\right] \varphi_{\underline{q}} \varphi_{-\underline{q}} \sim \langle \varphi_{\underline{q}} \varphi_{-\underline{q}} \rangle \tag{8.5.16}$$

而由式 (8.5.15) 知

$$\left.\frac{\partial^2 Z}{\partial \eta_{\underline{q}} \partial \eta_{-\underline{q}}}\right|_{\eta=0} \sim G(\underline{q}) \tag{8.5.17}$$

比较式 (8.5.16) 和式 (8.5.17) 就可以得出式 (8.5.13).

现在我们就立方晶格及最近邻耦合的情形来计算关联函数 G. 此时

$$J(\underline{q}) = \sum_{i-j} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\underline{q}\cdot(\underline{x}_i - \underline{x}_j)} J_{i-j} = 2J \sum_l \cos(q_i a) \tag{8.5.18}$$

其中, a 是格点间距; $l = x, y, z$. 将式 (8.5.18) 代入式 (8.5.11) 得

$$G^{-1}(\underline{q}) = \left[2\beta J \sum_l \cos(q_l a)\right]^{-1} - [1 - \text{th}^2(\varphi^0)] \tag{8.5.19}$$

在小 q 情形下, 可在余弦展开式中保留到 q^2 项, 这样得到

$$G(\underline{q}) = \frac{36\beta J}{a^2(\underline{q}^2 + \varDelta)} \tag{8.5.20}$$

其中

$$\Delta = 6\{1 - 6\beta J[1 - \mathrm{th}^2(\varphi^0)]\}/a^2 \tag{8.5.21}$$

在热力学极限下, $\underline{q}$ 由分离点集变成连续集; 对 $\underline{q}$ 的求和变成对 $\underline{q}$ 的积分. 故位形空间中的傅里叶分量为

$$\begin{aligned} G(\underline{x}) &= \frac{36\beta J}{a^2}\int \frac{\mathrm{d}^3 q}{(2\pi)^3}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{q}\cdot\underline{x}}\frac{1}{\underline{q}^2 + \Delta} = \frac{9\beta J}{4\pi^2 a^2}\int_0^\infty \mathrm{d}q\frac{q}{\mathrm{i}x}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}qx} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}qx}}{\underline{q}^2 + \Delta} \\ &= \frac{9\beta J}{2\pi^2 a^2 x}\int_{-\infty}^\infty \mathrm{d}q\mathrm{e}^{\mathrm{i}qx}\left(\frac{1}{q - \mathrm{i}\sqrt{\Delta}} + \frac{1}{q + \mathrm{i}\sqrt{\Delta}}\right) \end{aligned} \tag{8.5.22}$$

其中, 我们已取 z 轴沿 $\underline{x}$ 方向, 且 $q \equiv |\underline{q}|, x \equiv |\underline{x}|$. 再利用残数定理, 由于 $x > 0$, 我们可以选择上半平面的无穷大半圆作为积分围道, 得

$$G(x) = \frac{9\beta J}{\pi a^2 x}\mathrm{e}^{-\sqrt{\Delta}x} \tag{8.5.23}$$

关联长度 ξ 被定义为

$$G(x) \sim \mathrm{e}^{-x/\xi} \tag{8.5.24}$$

故知

$$\xi = \frac{1}{\sqrt{\Delta}} \tag{8.5.25}$$

因在临界点 T_C 处, ξ 为无穷大 ($\Delta = 0$), 故由式 (8.5.21) 得

$$1 - \frac{6J}{T_\mathrm{C}}\left[1 - \mathrm{th}^2(\varphi^0)\right] = 0 \tag{8.5.26}$$

临界温度 T_C 满足

$$T_\mathrm{C} = 6J\left[1 - \mathrm{th}^2(\varphi^0)\right] \tag{8.5.27}$$

将式 (8.5.27) 代入式 (8.5.21) 得

$$\Delta = \frac{6}{a^2 T}(T - T_\mathrm{C}) \tag{8.5.28}$$

由此知

$$\xi \sim |T - T_\mathrm{C}|^{-1/2} \tag{8.5.29}$$

所以由式 (8.1.4) 知临界指数 ν 为

$$\nu = 1/2 \tag{8.5.30}$$

又因

$$Z \sim \int \mathfrak{D}[\varphi] \exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{\underline{q}} \varphi_{\underline{q}} G^{-1}(\underline{q}) \varphi_{-\underline{q}}\right]$$

$$= \left[\det G^{-1}(\underline{q})\right]^{-1/2} = \exp\left[\frac{1}{2}\sum_{\underline{q}} \ln G(\underline{q})\right] \tag{8.5.31}$$

故自由能密度为

$$f \sim \ln Z \sim \int \frac{\mathrm{d}^d q}{(2\pi)^d} \ln G(\underline{q}) \tag{8.5.32}$$

这里我们近似地用积分代替求和, 并且式 (8.5.32) 推广到了 d 维情形. 现在考虑比热 C, 因

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{\partial U}{\partial s}\frac{\partial s}{\partial T} = T\frac{\partial s}{\partial T} = -T\frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \tag{8.5.33}$$

其中, U 是内能; s 是熵; F 是自由能. 再由式 (8.1.1) 知, 在临界点附近

$$C \sim |t|^{-\alpha} \tag{8.5.34}$$

根据式 (8.5.28) 知, $\varDelta$ 起着温度参量的作用, 因而比热 C 为

$$C \sim \frac{\partial^2 f}{\partial \varDelta^2} \sim \int_0^{\varLambda} \mathrm{d}^d q \frac{1}{(q^2+\varDelta)^2} \tag{8.5.35}$$

其中, $\varLambda$ 为大动量截断因子. 令 $x = q/\sqrt{\varDelta}$, 则

$$C \sim \varDelta^{(d-4)/2} \int_0^{\varLambda/\sqrt{\varDelta}} \mathrm{d}^d x \frac{1}{(x^2+1)^2} \tag{8.5.36}$$

显然当 $d<4$ 时, 取 $\varLambda$ 为 ∞ 也能保证积分收敛. 注意 x 无量纲, 因而积分是与 $\varDelta$ 无关的常数, 所以有

$$C \sim \varDelta^{(d-4)/2} \sim |t|^{(d-4)/2} \tag{8.5.37}$$

故临界指数 α 为

$$\alpha = 2 - d/2 \tag{8.5.38}$$

其他临界指数的计算需要引入磁场, 这里不再讨论.

前面我们已将分离自旋的 Ising 模型转化成连续场论形式 (8.5.3). 对于缓慢变化的场的情形, 我们还可以将其转化成由著名的金兹堡–朗道泛函表达的形式. 利用展开式:

$$\ln[2\mathrm{ch}(x)] = \ln 2 + \frac{x^2}{2} - \frac{1}{12}x^4 + \cdots \tag{8.5.39}$$

则式 (8.5.3) 可以写成如下形式：

$$Z = \int \mathfrak{D}[\varphi_i] \mathrm{e}^{-A[\varphi_i]} \tag{8.5.40}$$

其中

$$A[\varphi_i] = \frac{1}{2}\sum_{ij}\varphi_i(\beta J)^{-1}_{ij}\varphi_j - \frac{1}{2}\sum_i \varphi_i^2 + \frac{1}{12}\sum_i \varphi_i^4 \tag{8.5.41}$$

在前面已知

$$\frac{1}{2}\sum_{ij}\varphi_i(\beta J)^{-1}_{ij}\varphi_j = \frac{1}{2}\sum_{\underline{q}}\varphi_{\underline{q}}\left[\beta J(\underline{q})\right]^{-1}\varphi_{-\underline{q}} \tag{8.5.42}$$

对于 d 维超立方点阵, 有

$$J(\underline{q}) = 2J\sum_{i=1}^{d}\cos(q_i a) \approx 2dJ - Ja^2\underline{q}^2 \tag{8.5.43}$$

其中, 对于小动量 $\underline{q}$, 我们仅保留了二次幂. 将式 (8.5.43) 代入式 (8.5.42) 中得

$$\frac{1}{2}\sum_{\underline{q}}\left(\frac{1}{2\beta dJ} + \frac{a^2}{4\beta d^2 J}\underline{q}^2\right)\varphi_{\underline{q}}\varphi_{-\underline{q}} \tag{8.5.44}$$

现在定义如下的作为连续坐标 $\underline{x}$ 的函数的标量场 $\varphi(\underline{x})$：

$$\varphi(\underline{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\underline{q}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{q}\cdot\underline{x}}\varphi_{\underline{q}} \tag{8.5.45}$$

其中, V 是体积. 则

$$\sum_{\underline{q}}\varphi_{\underline{q}}\varphi_{-\underline{q}} = \int \mathrm{d}^d x \varphi^2(\underline{x}) \tag{8.5.46}$$

$$\int \mathrm{d}^d x (\boldsymbol{\nabla}\varphi)^2 = \sum_{\underline{q}}\underline{q}^2\varphi_{\underline{q}}\varphi_{-\underline{q}} \tag{8.5.47}$$

这样

$$\frac{1}{2}\sum_{ij}\varphi_i(\beta J)^{-1}_{ij}\varphi_j \to \frac{1}{2}\int \mathrm{d}^d x\left[\frac{1}{2\beta dJ}\varphi^2(\underline{x}) + \frac{a^2}{4\beta d^2 J}(\boldsymbol{\nabla}\varphi)^2\right]$$

同时

$$-\frac{1}{2}\sum_i\varphi_i^2 + \frac{1}{12}\sum_i\varphi_i^4 \to -\int \mathrm{d}^d x\left[\frac{1}{2}\varphi^2(\underline{x}) - \frac{1}{12}\varphi^4(\underline{x})\right]$$

所以在场的重新标度下, $\dfrac{a^2}{4\beta d^2 J}\varphi^2 \to \varphi^2$, 我们总可以得到

$$A[\varphi_i] \Rightarrow A[\varphi(\underline{x})] = \int \mathrm{d}^d x\left[\frac{1}{2}(\boldsymbol{\nabla}\varphi)^2 + \frac{r}{2}\varphi^2 + \frac{\lambda}{4!}\varphi^4\right] \tag{8.5.48}$$

其中

$$r=\frac{2d}{a^2}(1-2\beta dJ) \tag{8.5.49}$$

$$\lambda=\frac{a^d d^2}{4!}\left(\frac{8\beta dJ}{a^2}\right)^2 \tag{8.5.50}$$

$A[\varphi]$ 常被称为金磁堡–朗道泛函, 它具有重要的意义. 其原因如下：

(1) 它将 Ising 模型的长波长性质纳入了实标量的 “连续场论” 的形式中.

(2) 它提供了一个能够了解自发对称破缺及临界行为的简单方式.

例如, 式 (8.5.48) 中的被积函数 (用 $L(\varphi)$ 表示), 它在平均场临界温度 $T_0=2dJ$ 附近的图形如图 8.5.1 所示. 当 $T>T_0$ 时, 由式 (8.5.49) 可知 $r>0$. 这时 $L(\varphi)$ 在 $\varphi=0$ 处有一个极小值. 当 $r\to 0$ 时, $\varphi=0$ 处的函数曲线变得平坦起来, 从而导致很强的涨落. 当 $T<T_0$ 时, $r<0$, 并且在 $\pm\varphi_0$ 处出现两个极小值. 显然在 $\pm\varphi_0$ 处的对称性低于 $\varphi=0$ 处的对称性, 但是只要涨落足够强, 则体系将以相同的概率到达 $\pm\varphi_0$ 处的状态, 从而使得 φ 的平均值为零. 当温度从平均场临界温度 T_0 朝着体系的实际的临界温度 T_{C} 继续下降时, 则体系终将会处于对称破缺态 $\pm\varphi_0$ 的某个态中, 并且由于热涨落不足够强到能跨越两阱之间的势垒, 导致 φ 有非零的基态平均值.

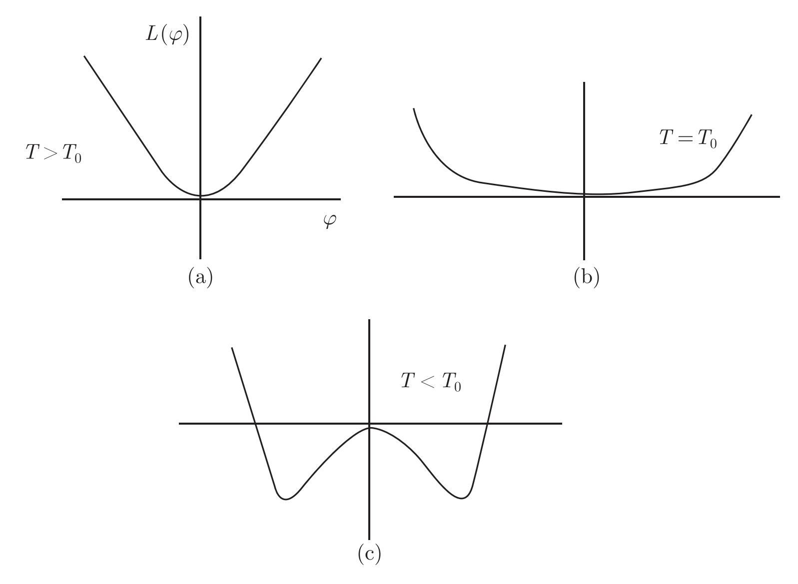


图 8.5.1　$L(\varphi)$ 与自发对称破缺

(3) 前面已经指出, 靠近临界点, 不同体系由某种普适的标度性质所表征, 这种性质仅依赖于空间维数 d 和序参量维数 n. 如果特定普适类中的每个体系能由一

个金兹堡–朗道形式的模型所表示, 那么临界现象的问题就约化成去确定在给定相变中的序参量的性质, 写出配分函数的金兹堡–朗道形式, 然后去计算 RG 方程.

当金兹堡–朗道泛函中的参数 λ 取零时, 可得到**高斯模型 (GM)**, 这是一个比较简单、可精确求解的模型, 它在讨论动量空间重整化群时经常用到. 其配分函数可写成

$$Z_{\mathrm{GM}} = \int \mathfrak{D}[\varphi]\mathrm{e}^{-A[\varphi]} \tag{8.5.51}$$

$$A[\varphi(\underline{x})] = \int \mathrm{d}^d x \left[\frac{1}{2}(\boldsymbol{\nabla}\varphi)^2 + \frac{r}{2}\varphi^2\right] \tag{8.5.52}$$

利用平移不变性并将坐标空间的场量 $\varphi(\underline{x})$ 用其傅里叶变换 (参见式 (8.5.45)) 来代替, 则有

$$Z_{\mathrm{GM}} = \int \mathfrak{D}[\varphi_{\underline{q}}]\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\sum\limits_{\underline{q}=0}^{\Lambda}(\underline{q}^2+r)\varphi_{\underline{q}}\varphi_{-\underline{q}}} \sim \prod_{\underline{q}=0}^{\Lambda}\sqrt{\frac{1}{\underline{q}^2+r}} \tag{8.5.53}$$

其中, Λ 为大动量截断以保证收敛性. 在实际固体问题中, 总存在一个自然的截断, 如 $\Lambda \sim 1/a$ (a 为格间距). 体系的自由能为

$$F_{\mathrm{GM}} = -\frac{1}{\beta}\ln Z_{\mathrm{GM}} = \frac{1}{2\beta}\sum_{\underline{q}=0}^{\Lambda}\ln(\underline{q}^2+r) + \frac{1}{\beta}\mathrm{const} \tag{8.5.54}$$

高斯模型的生成泛函为

$$Z_{\mathrm{GM}}[\eta] = \int \mathfrak{D}[\varphi]\mathrm{e}^{-A[\varphi;\eta]}$$

其中

$$A[\varphi;\eta] = \frac{1}{2}\sum_{\underline{q}=0}^{\Lambda}(\underline{q}^2+r)\varphi_{\underline{q}}\varphi_{-\underline{q}} + \sum_{\underline{q}=0}^{\Lambda}\eta_{\underline{q}}\varphi_{-\underline{q}} \tag{8.5.55}$$

含 $\eta_{\underline{q}}$ 的项为源项. 由附录 7A 知

$$Z_{\mathrm{GM}}[\eta] = Z_0\exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{\underline{q}=0}^{\Lambda}\frac{\eta_{\underline{q}}\eta_{-\underline{q}}}{\underline{q}^2+r}\right) \tag{8.5.56}$$

由此可以计算场量的各种平均值, 特别是

$$\langle\varphi_{\underline{q}}\varphi_{\underline{q}'}\rangle = \frac{1}{Z[0]}\left.\frac{\delta^2}{\delta\eta_{-\underline{q}}\delta\eta_{-\underline{q}'}}\right|_{\eta=0} = \frac{1}{\underline{q}^2+r}\delta_{\underline{q}+\underline{q}',\underline{0}} \tag{8.5.57}$$

为了进一步了解参量 r 的物理意义, 我们引入磁场, 在式 (8.5.52) 中引入塞曼项, 使得有磁场时的高斯模型为

$$A[\varphi;h] = \int \mathrm{d}^d x\left[\frac{1}{2}(\boldsymbol{\nabla}\varphi)^2 + \frac{r}{2}\varphi^2 - h\varphi\right] \tag{8.5.58}$$

利用磁化率的定义：

$$\chi \equiv -\partial_h^2 F \sim \int \mathrm{d}^d r \langle \varphi(\underline{x})\varphi(\underline{0})\rangle_{\mathrm{c}} \sim G(\underline{q}=0) \tag{8.5.59}$$

其中, $\langle \varphi(\underline{x})\varphi(\underline{x}')\rangle \equiv \langle \varphi(\underline{x})\varphi(\underline{x}')\rangle_{\mathrm{path}} \sim G(\underline{x}-\underline{x}')$ 是模型的格林函数. 再比较式 (8.5.57), 知

$$\chi \sim \frac{1}{r} \tag{8.5.60}$$

即对于高斯模型, 参数 r 对应于磁化率的导数, 并且在 $r=0$ 处磁化率的发散性表明 r 是体系离开临界点的量度. 显然参数 r 必须满足 $r>0$ 的要求, 这一方面是其物理意义的要求, 另一方面若 $r \leqslant 0$, 则会在小动量情形时, 使得式 (8.5.54) 中的对数失去意义.

第六节　动量空间重整化群

实空间重整化群的标度变换是在坐标 (实) 空间中进行的, 而动量空间重整化群的标度变换是在动量空间 (或波矢空间) 中进行的. 不过两者的基本思想却是相同的, 都是利用在临界点处的标度不变性.

一、动量空间 RG 分析的步骤

动量空间 RG 分析的步骤大致如下：

(1) 划分动量空间为小动量区和大动量区.

这种方案是取小动量区为

$$0 \leqslant |\underline{q}| < \Lambda/L$$

大动量区为

$$\Lambda/L \leqslant |\underline{q}| < \Lambda$$

其中, $L>1$ 是 RG 变换中的标度因子.

场量 $\varphi_{\underline{q}}$ 也相应地划分成小动量变量 (慢模)$\varphi_{\underline{q}}^{<}$(其中, $\underline{q}$ 位于小动量区) 和大动量变量 (快模)$\varphi_{\underline{q}}^{>}$(其中, $\underline{q}$ 位于大动量区). $\varphi_{\underline{q}}^{>}$ 携带体系的微观结构的信息. 如图 8.6.1 所示.

这样划分后, 我们以后就将对快模 $\varphi_{\underline{q}}^{>}$ 进行动量积分以移除短程涨落. 该积分称为动量壳积分. 这个方案会在 RG 分析的中间步骤中, 引起理论明显依赖于大动量截断 Λ.

(2) 对快模积分.

在实空间中, 是对 Kadanoff 集团内的自由度求平均以减少自由度, 而在动量空间中则是对快模部分积分来达到减少自由度的目的. 这一步往往涉及某种近似, 例

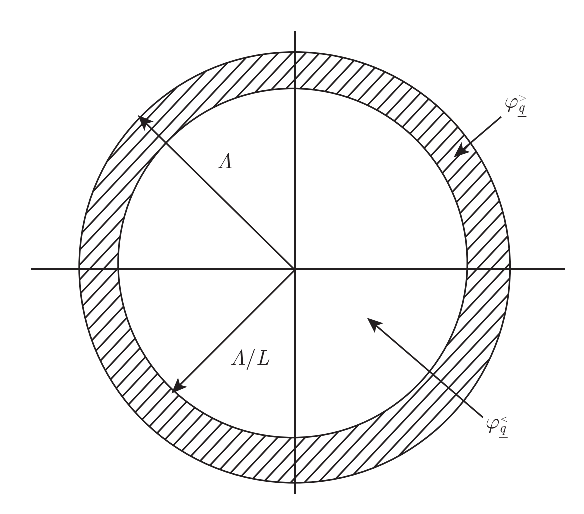


图 8.6.1　动量空间的划分

如, 累积展开近似方法. 一旦对快模 (或短程涨落) 积分, 我们就可以得到一个新的仅涉及慢模 (或长程涨落) 的作用量, 其中的耦合常数已经发生改变. 注意的是对快模积分也许会导致作用量中出现原来没有的 "新算符". 这种情形下, 人们必须调查新产生的算符在它们的标度行为中是否属于 "相关算符". 若是相关算符, 则应将这些算符包括到一个扩大的作用量中去, 其中有一个预先未确定的耦合常数. 然后验证这个扩大的作用量是否代表了一个闭合的体系, 即不会再导致新算符的产生. 否则可重复这一步直到得到一个闭合体系.

(3) 重标度.

由于在移除快模后, 得到了慢模 $\varphi_{\underline{q}}^{<}$ 的有效作用量, 根据 RG 变换的定义, 我们应该使这个有效作用量与原作用量有相似的形式 (仅耦合常数发生改变). 首先, 由于 $\varphi_{\underline{q}}^{<}$ 的动量截断是 Λ/L 而不是 Λ, 所以我们应重新定标, 使得截断恢复原来的值. 故令

$$\underline{q} \to \underline{q}' = L\underline{q} \tag{8.6.1}$$

这相当于把 $\underline{q}$ 的范围放大 L 倍, 使得 $\underline{q}'$ 变化范围又回到了 $(0, \Lambda)$. 在需要考虑频率的重标度时, 令

$$\omega \to \omega' = L^z \omega \tag{8.6.2}$$

其中, z 为动力学指数.

其次, 注意到在配分函数中, 场量只是一个积分变量, 因而是可以任意定标的. 利用这种自由性, 令

$$\varphi_{\underline{q}}^{<} \to \varphi'_{\underline{q}'} = L^{-d_\varphi} \varphi_{\underline{q}}^{<} \tag{8.6.3}$$

式 (8.6.3) 称为**场重整化**, 其中, L^{d_φ} 为重标度因子. 引入它的目的是能补偿算符在重整化后引起的额外因子, 从而实现作用量在形式上的相似性, 但此时重标度后的作用量有着新的耦合常数, 这样我们就可以建立起新旧耦合常数之间的关系, 就可以找出重整化群变换.

以下的步骤与实空间 RG 完全一样:

(4) 确定重整化群变换下的不动点.

(5) 计算临界指数.

二、高斯模型的 RG 分析

我们首先选高斯模型来作 RG 分析, 这是由于它比较简单, 可以和严格解比较. 它的 RG 分析方法是讨论其他更为复杂模型的基础.

高斯模型的奇异性只出现在 $\underline{q}=0(r\to 0)$ 处. 因此从奇异性来看, $\underline{q}=0$ 附近的区域, 即小波矢 (或长波长区域) 对临界行为起决定性作用. 对于这种区域, 高斯模型 (有磁场时) 式 (8.5.58) 的傅里叶变换可以写成

$$A[\varphi]=\frac{1}{2}\sum_{\underline{q}=0}^{\Lambda}\left(\underline{q}^2+r\right)\varphi_{\underline{q}}\varphi_{-\underline{q}}-\tilde{h}\varphi_0 \tag{8.6.4}$$

其中, $\varphi_0\equiv\varphi_{\underline{q}=0}$; $\tilde{h}=h\sqrt{V}$. 在热力学极限下, $\underline{q}$ 是连续的. 按照我们对动量空间的划分, 则配分函数可写成

$$\begin{aligned}Z=&\int\mathfrak{D}[\varphi_{\underline{q}}^{<}]\exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{\underline{q}=0}^{\Lambda/L}\left(\underline{q}^2+r\right)\varphi_{\underline{q}}^{<}\varphi_{-\underline{q}}^{<}+\tilde{h}\varphi_0^{<}\right]\\&\times\int\mathfrak{D}[\varphi_{\underline{q}}^{>}]\exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{\underline{q}=\Lambda/L}^{\Lambda}\left(\underline{q}^2+r\right)\varphi_{\underline{q}}^{>}\varphi_{-\underline{q}}^{>}\right]\end{aligned} \tag{8.6.5}$$

即

$$Z=\mathrm{e}^{-\beta F^{>}}\int\mathfrak{D}[\varphi_{\underline{q}}^{<}]\exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{\underline{q}=0}^{\Lambda/L}\left(\underline{q}^2+r\right)\varphi_{\underline{q}}^{<}\varphi_{-\underline{q}}^{<}+\tilde{h}\varphi_0^{<}\right] \tag{8.6.6}$$

其中, $\mathrm{e}^{-\beta F^{>}}$ 对应于快模的积分. 由于奇异性来自 $\underline{q}=0$ 附近的小动量区, 故快模的积分应该是非奇异的平滑函数. 如果我们只关心临界行为, 那么在 RG 分析中就可以忽略掉这一部分 (故不用去作这部分的积分运算). 现在按式 (8.6.1) 和式 (8.6.3) 进行重标度. 注意在式 (8.6.1) 的重标度下, 有

$$\sum_{\underline{q}=0}^{\Lambda/L}\to L^{-d}\sum_{\underline{q}'=0}^{\Lambda} \tag{8.6.7}$$

这通过将它们写成明显的积分形式, 就不难加以验证. 这样

$$A[\varphi]=\frac{1}{2}\sum_{\underline{q}=0}^{\Lambda/L}\left(\underline{q}^2+r\right)\varphi_{\underline{q}}^{<}\varphi_{-\underline{q}}^{<}-\tilde{h}\varphi_0^{<}\rightarrow$$

$$\begin{aligned}A[\varphi'_{\underline{q}'}]&=\frac{1}{2}L^{-d}\sum_{\underline{q}'=0}^{\Lambda}\left(\frac{\underline{q}'^2}{L^2}+r\right)L^{2d_\varphi}\varphi'_{\underline{q}'}\varphi'_{-\underline{q}'}-L^{d_\varphi}\tilde{h}\varphi'_0\\&=\frac{1}{2}L^{-d-2+2d_\varphi}\sum_{\underline{q}'=0}^{\Lambda}\left(\underline{q}'^2+L^2r\right)\varphi'_{\underline{q}'}\varphi'_{-\underline{q}'}-L^{d_\varphi}\tilde{h}\varphi'_0\end{aligned}\tag{8.6.8}$$

显然, 只要分别令

$$d_\varphi=1+d/2\tag{8.6.9}$$

$$\begin{cases}r'=L^2r\\\tilde{h}'=L^{1+d/2}\tilde{h}\end{cases}\tag{8.6.10}$$

就会使得作用量的形式具有标度变换前的形式. 由此我们得到了 RG 变换的方程 (8.6.10). 显然不动点应满足

$$L^2r^*=r^*,\quad L^{1+d/2}\tilde{h}^*=\tilde{h}^*\tag{8.6.11}$$

其可能解为

$$r^*=0,\infty,\quad \tilde{h}^*=0,\infty\tag{8.6.12}$$

运用迭代法不难确定 $(r^*,\tilde{h}^*)=(0,0)$ 是不稳定不动点 (叫**高斯不动点**), 它对应于临界点. 由 r 和 $\tilde{h}$ 的定义式就可以确定临界温度 $T_{\mathrm{C}}=2dJ$ 和临界磁场 $B_{\mathrm{C}}=0$. 由于式 (8.6.10) 本身就是线性化的, 而且其变换矩阵也是对角矩阵, 所以本征值就是 $\lambda_r=L^2,\lambda_h=L^{1+d/2}$. 这样, 利用式 (8.3.16) 得标度幂:

$$a=\frac{\ln\lambda_r}{d\ln L}=\frac{2}{d},\quad b=\frac{\ln\lambda_h}{d\ln L}=\frac{1}{2}+\frac{1}{d}\tag{8.6.13}$$

故高斯模型的临界指数分别为

$$\alpha=2-\frac{1}{a}=2-\frac{d}{2},\quad \beta=\frac{1-b}{a}=\frac{d}{4}-\frac{1}{2},\quad \gamma=\frac{2b-1}{a}=1\tag{8.6.14}$$

$$\nu=\frac{1}{ad}=\frac{1}{2},\quad \delta=\frac{b}{1-b}=\frac{2+d}{d-2},\quad \eta=2+d(1-2b)=0\tag{8.6.15}$$

第七节 φ^4 模型的 RG 分析、ε-展开

有外场作用的 φ^4 模型的作用量为

$$A[\varphi]=\int \mathrm{d}^d x\left[\frac{1}{2}(\boldsymbol{\nabla}\varphi)^2+\frac{r}{2}\varphi^2+\frac{\lambda}{4!}\varphi^4-h\varphi\right] \tag{8.7.1}$$

为简单起见, 我们的 RG 分析只将在 ε、耦合常数以及动量圈数的展开上用最低阶近似. 在动量表象中, 作用量为

$$\begin{aligned}A[\varphi]&=\frac{1}{2}\sum_{\underline{q}=0}^{\Lambda}\left(\underline{q}^2+r\right)\varphi_{\underline{q}}\varphi_{-\underline{q}}-\tilde{h}\varphi_0+\tilde{\lambda}\sum_{\underline{q}_1\underline{q}_2\underline{q}_3\underline{q}_4}\varphi_{\underline{q}_1}\varphi_{\underline{q}_2}\varphi_{\underline{q}_3}\varphi_{\underline{q}_4}\delta(\underline{q}_1+\underline{q}_2+\underline{q}_3+\underline{q}_4)\\&=A_0[\varphi]+A_{\mathrm{I}}[\varphi]\end{aligned} \tag{8.7.2}$$

其中, $\tilde{\lambda}=\lambda/(4!V)$; $A_0[\varphi]$ 是本章第六节讨论过的有磁场时的高斯模型的作用量. 在高斯模型中, 快模和慢模没有混合, 而 φ^4 模型中的四次幂的相互作用项 $A_{\mathrm{I}}[\varphi]$ 却把快模和慢模混合在一起了. 我们将作用量表达成如下形式:

$$A[\varphi^<,\varphi^>]=A_0[\varphi^<]+A_0[\varphi^>]+A_{\mathrm{I}}[\varphi^<,\varphi^>] \tag{8.7.3}$$

故配分函数为

$$\begin{aligned}Z&=\int\mathfrak{D}[\varphi^<]\mathfrak{D}[\varphi^>]\mathrm{e}^{-A_0[\varphi^<]}\mathrm{e}^{-A_0[\varphi^>]}\mathrm{e}^{-A_{\mathrm{I}}[\varphi^<,\varphi^>]}\\&=\int\mathfrak{D}[\varphi^<]\mathrm{e}^{-A_0[\varphi^<]}\int\mathfrak{D}[\varphi^>]\mathrm{e}^{-A_0[\varphi^>]}\mathrm{e}^{-A_{\mathrm{I}}[\varphi^<,\varphi^>]}\\&=\int\mathfrak{D}[\varphi^<]\mathrm{e}^{-A_{\mathrm{eff}}[\varphi^<]}\end{aligned} \tag{8.7.4}$$

其中, 有效作用量为

$$\begin{aligned}\mathrm{e}^{-A_{\mathrm{eff}}[\varphi^<]}&=\mathrm{e}^{-A_0[\varphi^<]}\int\mathfrak{D}[\varphi^>]\mathrm{e}^{-A_0[\varphi^>]}\mathrm{e}^{-A_{\mathrm{I}}[\varphi^<,\varphi^>]}\\&=\mathrm{e}^{-A_0[\varphi^<]}\frac{\displaystyle\int\mathfrak{D}[\varphi^>]\mathrm{e}^{-A_0[\varphi^>]}\mathrm{e}^{-A_{\mathrm{I}}[\varphi^<,\varphi^>]}}{\displaystyle\int\mathfrak{D}[\varphi^>]\mathrm{e}^{-A_0[\varphi^>]}}Z_0^>\end{aligned} \tag{8.7.5}$$

式中

$$Z_0^>=\int\mathfrak{D}[\varphi^>]\mathrm{e}^{-A_0[\varphi^>]} \tag{8.7.6}$$

由于 $Z_0^>$ 是一个与 $\varphi^<$ 无关的常数因子, 故可以略去. 这样我们得到

$$\mathrm{e}^{-A_{\text{eff}}[\varphi^<]} = \mathrm{e}^{-A_0[\varphi^<]}\langle \mathrm{e}^{-A_{\mathrm{I}}[\varphi^<,\varphi^>]}\rangle_{0>} = \mathrm{e}^{-A_0[\varphi^<]-\delta A_{\text{eff}}[\varphi^<]} \tag{8.7.7}$$

式中, $\langle\cdots\rangle_{0>}$ 是表示对快模的平均且其中的权重因子为 $\mathrm{e}^{-A_0[\varphi^>]}$.

为了计算对快模的平均, 我们要利用累积展开公式:

$$\langle \mathrm{e}^A\rangle = \mathrm{e}^{\left[\langle A\rangle + (\langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2)/2 + \cdots\right]} \tag{8.7.8}$$

它可以如下验证:

$$\ln\langle \mathrm{e}^A\rangle = \ln\left(1 + \langle A\rangle + \frac{1}{2!}\langle A^2\rangle + \frac{1}{3!}\langle A^3\rangle + \cdots\right)$$

利用 $\ln(1+x) = x - \dfrac{x^2}{2} + \dfrac{x^3}{3} - \cdots$, 并取 $x = \langle A\rangle + \dfrac{1}{2!}\langle A^2\rangle + \dfrac{1}{3!}\langle A^3\rangle + \cdots$, 则

$$\begin{aligned}\ln\langle \mathrm{e}^A\rangle =& \left(\langle A\rangle + \frac{1}{2!}\langle A^2\rangle + \frac{1}{3!}\langle A^3\rangle + \cdots\right)\\ &-\frac{1}{2}\left(\langle A^2\rangle + \langle A\rangle\langle A^2\rangle + \cdots\right) + \frac{1}{3}\left(\langle A\rangle^3 + \cdots\right)\\ =&\langle A\rangle + \frac{1}{2!}\left(\langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2\right) + \frac{1}{3!}\left(\langle A^3\rangle - 3\langle A\rangle\langle A^2\rangle + 2\langle A\rangle^3\right) + \cdots\end{aligned}$$

故式 (8.7.8) 成立. 它将求指数的平均变成求平均的指数, 这样得到

$$\begin{aligned}\delta A_{\text{eff}}[\varphi^<] &= \langle A_{\mathrm{I}}\rangle_{0>} - \frac{1}{2}\left(\langle A_{\mathrm{I}}^2\rangle_{0>} - \langle A_{\mathrm{I}}\rangle_{0>}^2\right) + \cdots\\ &\equiv \delta A_{\text{eff}}^{(1)}[\varphi^<] + \delta A_{\text{eff}}^{(2)}[\varphi^<] + \cdots\end{aligned} \tag{8.7.9}$$

现在我们来计算领头阶项 $\langle A_{\mathrm{I}}\rangle_{0>}$(注意: A_{I} 是弱耦合常数 $\tilde{\lambda}$ 的一次幂).

$$\begin{aligned}\delta A_{\text{eff}}^{(1)}[\varphi^<] \equiv \langle A_{\mathrm{I}}\rangle_{0>} &= \left\langle \tilde{\lambda}\sum_{\underline{q}_1\underline{q}_2\underline{q}_3\underline{q}_4} \varphi_{\underline{q}_1}\varphi_{\underline{q}_2}\varphi_{\underline{q}_3}\varphi_{\underline{q}_4}\delta(\underline{q}_1+\underline{q}_2+\underline{q}_3+\underline{q}_4)\right\rangle_{0>}\\ &= \tilde{\lambda}\left\langle \sum_{\underline{q}_1\underline{q}_2\underline{q}_3\underline{q}_4}(\varphi_{\underline{q}_1}^<+\varphi_{\underline{q}_1}^>)(\varphi_{\underline{q}_2}^<+\varphi_{\underline{q}_2}^>)(\varphi_{\underline{q}_3}^<+\varphi_{\underline{q}_3}^>)(\varphi_{\underline{q}_4}^<+\varphi_{\underline{q}_4}^>)\right.\\ &\quad\left.\cdot\delta(\underline{q}_1+\underline{q}_2+\underline{q}_3+\underline{q}_4)\right\rangle_{0>}\end{aligned}$$

式中, 由场量构成的 16 个单项式, 它们可分为如下不同类型 (为简单起见, 我们略去动量指标):

(1) $\varphi^<\varphi^<\varphi^<\varphi^<$, 其中所有场都是慢模, 共一项.

(2) $\varphi^>\varphi^>\varphi^>\varphi^>$, 其中所有场都是快模, 共一项.

(3) $\varphi^<\varphi^>\varphi^>\varphi^>$, 其中有一个慢模、三个快模, 共四项.

(4) $\varphi^>\varphi^<\varphi^<\varphi^<$, 其中有一个快模、三个慢模, 共四项.

(5) $\varphi^>\varphi^>\varphi^<\varphi^<$, 其中有二个快模、二个慢模, 共六项.

注意到对动量的积分是在对称区间里进行的, 利用奇偶性, 可知第 (3) 类和第 (4) 类的积分为零. 而第 (2) 类的积分结果对于有效作用量只提供了一个与 $\varphi^<$ 无关的常数, 故可略去. 因此我们只需要考虑第 (1) 类和第 (5) 类.

第 (1) 类所对应的项只有慢模, 因而可从对快模的积分号中提出, 剩下的积分部分刚好可以与分母中的积分消去 (参见式 (8.7.5)), 从而得

$$\delta A_{\text{eff}}^{(1,\text{tree})}[\varphi^<] = \tilde{\lambda} \sum_{\underline{q}_1\underline{q}_2\underline{q}_3\underline{q}_4} \varphi^<_{\underline{q}_1}\varphi^<_{\underline{q}_2}\varphi^<_{\underline{q}_3}\varphi^<_{\underline{q}_4}\delta(\underline{q}_1+\underline{q}_2+\underline{q}_3+\underline{q}_4) \tag{8.7.10}$$

其中, 动量取值在小动量区. 该项对应了费曼图的树图 (tree graph), 如图 8.7.1 所示.

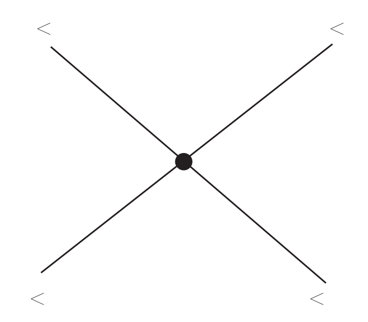


图 8.7.1　$\delta A_{\text{eff}}^{(1,\text{tree})}$ 对应的树图

在图 8.7.1 中, 四根线是外线, 都是慢模线. 它们不收缩成传播子, 这是式 (8.7.10) 中没有平均出现的反映. 每个顶角将贡献一个因子 $\tilde{\lambda}$, 并满足动量守恒. 在动量和场量的重标度下, 有

$$\delta A_{\text{eff}}^{(1,\text{tree})}[\varphi'] = L^{4-d}\tilde{\lambda} \sum_{\underline{q}'_1\underline{q}'_2\underline{q}'_3\underline{q}'_4} \varphi_{\underline{q}'_1}\varphi_{\underline{q}'_2}\varphi_{\underline{q}'_3}\varphi_{\underline{q}'_4}\delta(\underline{q}'_1+\underline{q}'_2+\underline{q}'_3+\underline{q}'_4) \tag{8.7.11}$$

其中, 动量取值在 $[0,\Lambda]$.

第 (5) 类所对应的项有六项, 其中每项都有二个快模、二个慢模而且每项都有相同的贡献, 可取其中一项进行计算:

$$\tilde{\lambda} \sum_{\underline{q}_1\underline{q}_2\underline{q}_3\underline{q}_4} \langle\varphi^>_{\underline{q}_1}\varphi^>_{\underline{q}_2}\rangle_{0>}\varphi^<_{\underline{q}_3}\varphi^<_{\underline{q}_4}\delta(\underline{q}_1+\underline{q}_2+\underline{q}_3+\underline{q}_4) \tag{8.7.12}$$

它对应了费曼图的蝌蚪图 (tadpole graph), 如图 8.7.2 所示.

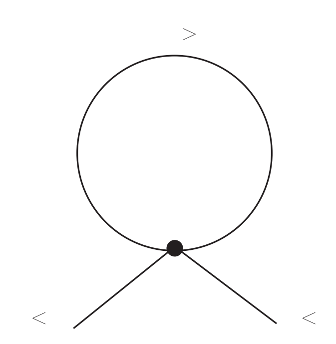


图 8.7.2　式 (8.7.12) 对应的蝌蚪图

注意到传播子为

$$\langle \varphi_{\underline{q}_1}^{>} \varphi_{\underline{q}_2}^{>} \rangle_{0>} = \int_{\Lambda/L}^{\Lambda} \frac{\mathrm{d}^d q_1}{(2\pi)^d} \frac{1}{\underline{q}_1^2 + r} \delta(\underline{q}_1 + \underline{q}_2) \tag{8.7.13}$$

在临界点附近, $r \ll q_1^2$, 我们可将该积分展开到 r 的一阶:

$$\int_{\Lambda/L}^{\Lambda} \frac{\mathrm{d}^d q_1}{(2\pi)^d} \frac{1}{\underline{q}_1^2 + r} \approx \int_{\Lambda/L}^{\Lambda} \frac{\mathrm{d}^d q_1}{(2\pi)^d} \left(\frac{1}{\underline{q}_1^2} - \frac{r}{\underline{q}_1^4} \right) \tag{8.7.14}$$

利用

$$\begin{aligned} \int_{\Lambda/L}^{\Lambda} \frac{\mathrm{d}^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{\underline{q}^{2\alpha}} &= \frac{S_d}{(2\pi)^d} \int_{\Lambda/L}^{\Lambda} \mathrm{d}q q^{d-1-2\alpha} \\ &= \frac{S_d}{(2\pi)^d} \frac{\Lambda^{d-2\alpha}(1 - L^{2\alpha-d})}{d - 2\alpha} \end{aligned} \tag{8.7.15}$$

其中, $q \equiv |\underline{q}|$, 且 $S_d = 2\pi^{d/2}/\Gamma(d/2)$ 是借助于伽马函数表达的 d 维单位球的面积. 故

$$\delta A_{\text{eff}}^{(1,\text{tadpole})}[\varphi^<] = 6\tilde{\lambda} \frac{S_d}{(2\pi)^d} \left[\frac{\Lambda^{d-2}(1 - L^{2-d})}{d-2} - r \frac{\Lambda^{d-4}(1 - L^{4-d})}{d-4} \right] \sum_{\underline{q}_3} \varphi_{\underline{q}_3}^< \varphi_{-\underline{q}_3}^< \tag{8.7.16}$$

在动量和场量的重标度下, 有

$$\delta A_{\text{eff}}^{(1,\text{tadpole})}[\varphi'] = L^2 6\tilde{\lambda} \frac{S_d}{(2\pi)^d} \left[\frac{\Lambda^{d-2}(1 - L^{2-d})}{d-2} - r \frac{\Lambda^{d-4}(1 - L^{4-d})}{d-4} \right] \sum_{\underline{q}_3'} \varphi_{\underline{q}_3'} \varphi_{-\underline{q}_3'} \tag{8.7.17}$$

由式 (8.7.17) 以及式 (8.6.8) 可以得到在单圈水平上的重整化耦合常数 r' 为

$$r' = L^2 \left[r + \frac{12\tilde{\lambda} S_d}{(2\pi)^d} \frac{\Lambda^{d-2}(1 - L^{2-d})}{d-2} - \frac{12\tilde{\lambda} r S_d}{(2\pi)^d} \frac{\Lambda^{d-4}(1 - L^{4-d})}{d-4} \right] \tag{8.7.18}$$

现在来看 $\delta A_{\text{eff}}^{(2)}[\varphi^<]$ 项：

$$\delta A_{\text{eff}}^{(2)}[\varphi^<] \equiv -\frac{1}{2}\left(\langle A_{\text{I}}^2\rangle_{0>} - \langle A_{\text{I}}\rangle_{0>}^2\right) \tag{8.7.19}$$

借助于 Wick 定理不难看出, $\langle A_{\text{I}}\rangle_{0>}^2$ 只对应于非连通图, 它可以消去 $\langle A_{\text{I}}^2\rangle_{0>}$ 中的非连通图. 故对于 $\delta A_{\text{eff}}^{(2)}[\varphi^<]$, 我们只需考虑连通图. 这样在单圈水平上, 可画出如图 8.7.3 所示的图形.

$$\begin{aligned}\delta A_{\text{eff}}^{(2)}[\varphi^<] = &-36\tilde{\lambda}^2\int_{\Lambda/L}^{\Lambda}\frac{\mathrm{d}^d p}{(2\pi)^d}\frac{1}{(\underline{p}^2+r)\left[(\underline{q}_1-\underline{q}_3+\underline{p})^2+r\right]}\\ &\times\sum_{\underline{q}_1\underline{q}_2\underline{q}_3\underline{q}_4}\varphi_{\underline{q}_1}^<\varphi_{\underline{q}_2}^<\varphi_{\underline{q}_3}^<\varphi_{\underline{q}_4}^<\delta(\underline{q}_1+\underline{q}_2+\underline{q}_3+\underline{q}_4)\end{aligned} \tag{8.7.20}$$

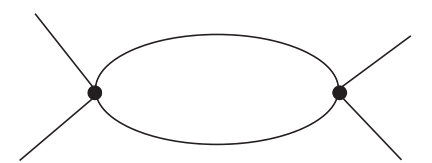


图 8.7.3 $\delta A_{\text{eff}}^{(2)}$ 所对应的单圈图

在动量和场量的重标度下, 有

$$\begin{aligned}\delta A_{\text{eff}}^{(2)}[\varphi'] = &-36\tilde{\lambda}^2 L^{4-d}\sum_{\underline{q}'_1\underline{q}'_2\underline{q}'_3\underline{q}'_4}\varphi'_{\underline{q}'_1}\varphi'_{\underline{q}'_2}\varphi'_{\underline{q}'_3}\varphi'_{\underline{q}'_4}\delta(\underline{q}'_1+\underline{q}'_2+\underline{q}'_3+\underline{q}'_4)\\ &\times\int_{\Lambda/L}^{\Lambda}\frac{\mathrm{d}^d p}{(2\pi)^d}\frac{1}{(\underline{p}^2+r)\left[\left(\underline{p}+\dfrac{\underline{q}'_1}{L}+\dfrac{\underline{q}'_3}{L}\right)^2+r\right]}\end{aligned} \tag{8.7.21}$$

由式 (8.7.21) 以及式 (8.7.11) 可知, 在单圈水平上的重整化耦合常数 $\tilde{\lambda}'$ 为

$$\tilde{\lambda}' = L^{4-d}\left[\tilde{\lambda} - 36\tilde{\lambda}^2\int_{\Lambda/L}^{\Lambda}\frac{\mathrm{d}^d p}{(2\pi)^d}\frac{1}{(\underline{p}^2+r)^2}\right] \tag{8.7.22}$$

这里我们已将式 (8.7.21) 的积分表达式中的外动量 $\underline{q}'_1$ 和 $\underline{q}'_3$ 都取为零, 这是因为对外 (慢) 动量的泰勒展开将会在级数中生成高阶不相关项. 再利用式 (8.7.15) 可知

$$\tilde{\lambda}' = L^{4-d}\left[\tilde{\lambda} - 36\tilde{\lambda}^2\frac{S_d}{(2\pi)^d}\frac{\Lambda^{d-4}(1-L^{4-d})}{d-4}\right] + 0(\tilde{\lambda}^2 r) \tag{8.7.23}$$

而重整化耦合常数 $\tilde{h}'$ 仍然与高斯模型一样：

$$\tilde{h}' = L^{1+d/2}\tilde{h} \tag{8.7.24}$$

现在令 $d=4-\varepsilon$, 并注意 $S_{4-\varepsilon}\approx S_4=2\pi^2$, $L^{4-d}\approx 1+\varepsilon\ln L$, 则在 ε 的一阶水平上得

$$r'=L^2\left[r+\frac{3\tilde{\lambda}\Lambda^2(1-L^{-2})}{4\pi^2}-\frac{3\tilde{\lambda}r\ln L}{2\pi^2}\right] \tag{8.7.25}$$

$$\tilde{\lambda}'=\left(\tilde{\lambda}-\frac{9\tilde{\lambda}^2\ln L}{2\pi^2}\right)(1+\varepsilon\ln L) \tag{8.7.26}$$

$$\tilde{h}'=\tilde{h}L^{3-\varepsilon/2} \tag{8.7.27}$$

由此可得 Gell-Mann Low 方程:

$$\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}\ell}=2r+\frac{3}{2}\frac{\tilde{\lambda}}{\pi^2}\Lambda^2-\frac{3}{2}\frac{\tilde{\lambda}r}{\pi^2} \tag{8.7.28}$$

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{\lambda}}{\mathrm{d}\ell}=\varepsilon\tilde{\lambda}-\frac{9\tilde{\lambda}^2}{2\pi^2} \tag{8.7.29}$$

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{h}}{\mathrm{d}\ell}=\tilde{h}\left(3-\frac{\varepsilon}{2}\right) \tag{8.7.30}$$

令上面的方程组右端为零 (暂时忽略磁场), 我们可得高斯不动点

$$(r_1^*,\tilde{\lambda}_1^*)=(0,0) \tag{8.7.31}$$

以及 Wilson-Fisher(WF) 不动点$(r_2^*,\tilde{\lambda}_2^*)$. 对于后者, 可以首先由式 (8.7.29) 得

$$\tilde{\lambda}_2^*=\frac{2\pi^2\varepsilon}{9} \tag{8.7.32}$$

最后注意到 r 本身也是 ε 的量级, 故在 ε 的一阶的水平上, 可略去式 (8.7.28) 右端最后一项, 从而有

$$r_2^*=-\frac{\varepsilon}{6}\Lambda^2 \tag{8.7.33}$$

显然, 当 $\varepsilon\to 0$ 时, WF 不动点趋近于高斯不动点. 根据式 (8.7.29), 我们画出 $R^\ell(\tilde{\lambda})$-$\tilde{\lambda}$ 曲线图 8.7.4, 其中, $R^\ell(\tilde{\lambda})=\varepsilon\tilde{\lambda}-\dfrac{9\tilde{\lambda}^2}{2\pi^2}$.

由该图不难看出, 当 $\varepsilon>0$(即 $d<4$) 时, $\tilde{\lambda}$ 在高斯不动点是相关的, 但在 WF 不动点是无关的. 这意味着含 $\tilde{\lambda}$ 的 4 次相互作用项将以 WF 不动点所对应的值起作用, 而不是以高斯不动点所对应的值起作用. 换句话说, 高斯不动点不能描述 $d<4$ 情形下的临界行为而是 WF 不动点支配 $d<4$ 情形下的临界行为. 但是另一方面, 对于 $\varepsilon<0$(即 $d>4$) 的情形, $\tilde{\lambda}$ 在高斯不动点是无关的, 此时高斯不动点确实代表了临界行为.

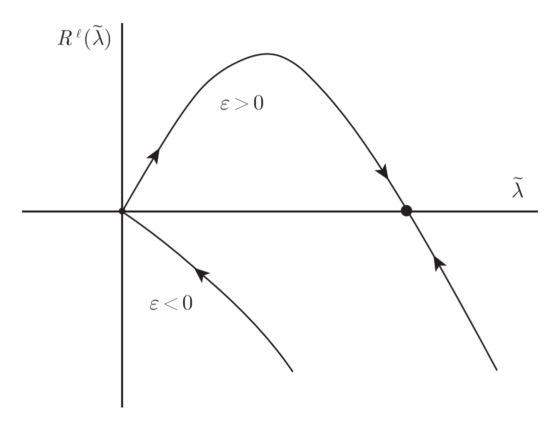


图 8.7.4 $R^{\ell}(\tilde{\lambda}) - \tilde{\lambda}$ 曲线图

现在我们考虑 WF 不动点并在该点将 Gell-Mann Low 方程 (8.7.28)~(8.7.30) 线性化, 可得线性化矩阵 W：

$$W = \begin{pmatrix} 2 - \dfrac{\varepsilon}{3} & \dfrac{3\Lambda^2}{2\pi^2}\left(1 + \dfrac{\varepsilon}{3}\right) & 0 \\ 0 & -\varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & 3 - \dfrac{\varepsilon}{2} \end{pmatrix} \tag{8.7.34}$$

可见对于 $d = 4 - \varepsilon < 4$ 情形, 有本征值

$$2 - \frac{\varepsilon}{3} \equiv y_t, \quad 3 - \frac{\varepsilon}{2} \equiv y_h, \quad -\varepsilon \tag{8.7.35}$$

其中, 前两个本征值是相关的 (注意 r 起着温度作用), 而本征值 $-\varepsilon$ 却是无关的.

我们将前面得到的结果中所蕴含的流显示在图 8.7.5 中, 其中, (a) 对应于 $d > 4$ 的情形, 它也表明 $d > 4$ 时的高斯不动点 G 对于 $\tilde{\lambda}$ 是稳定的. (b) 对应于 $d < 4$ 的情形, 它表明高斯不动点对于 $\tilde{\lambda}$ 是不稳定的. 沿着连接高斯不动点和 WF 不动点的线上的点将流向 WF 不动点, 这样所有沿着这个线的哈密顿是处于相同的普适类并有着相同的确定的指数. 注意图中已将 $\tilde{\lambda} < 0$ 的区域标记为非物理区, 因为此时体系的作用量是不稳定的, 除非考虑加入新的更高次作用.

利用式 (8.3.28)、式 (8.3.29) 以及式 (8.7.35), 可得临界指数为

$$\alpha = \frac{\varepsilon}{3}, \quad \beta = \frac{1}{2} - \frac{\varepsilon}{6}, \quad \gamma = 1 + \frac{\varepsilon}{6} \tag{8.7.36}$$

$$\delta = 3 + \varepsilon, \quad \nu = \frac{1}{2 - \varepsilon/3} \approx \frac{1}{2} + \frac{\varepsilon}{12}, \quad \eta = 0 \tag{8.7.37}$$

如果简单地取 $\varepsilon = 1$(即 $d = 3$), 则由式 (8.6.51) 和式 (8.6.52) 得到 $0(\varepsilon)$ 量级下的三维空间中的临界指数. 表 8.7.1 中列出了这些指数还有相应的实验值和平均场论的计算值以及 $0(\varepsilon^5)$ 量级下的计算值以便进行比较.

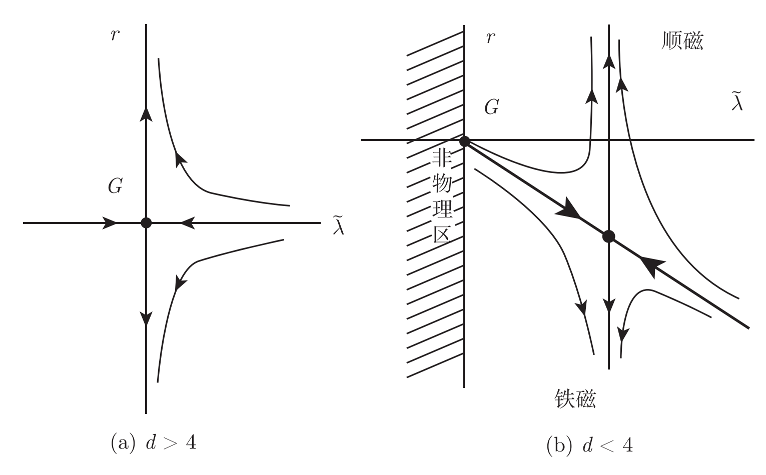


图 8.7.5　RG 流

表 8.7.1　铁磁相变的临界指数

指数	实验值	平均场论	ε^1	ε^5
α	0～0.14	0	1/3	0.109
β	0.32～0.39	1/2	1/3	0.327
γ	1.3～1.4	1	7/6	1.238
δ	4～5	3	4	4.786
ν	0.6～0.7	–	7/12	0.631
η	0.05	–	0	0.037

对动量空间的划分除了前面已讨论过的方案以外, 另一种划分方案是对所有高位自由度 $|\underline{q}| \geqslant \lambda^{-1}$ 的变量 $\varphi_{\underline{q}}^{(s)}$ 都积分. 由于积分上限为无穷, 故常会遇到发散积分. 在量子场论中, 有多种处理发散的方式, 其中一种优美的方式是所谓 “维数正规化” 方案. 在这个途径中, 人们形式地把积分维数 d 推广成非整数维数 $d \pm \varepsilon$, 从而使得积分收敛. 这样人们就能获得积分对截断 λ^{-1} 的依赖关系.

第八节　量子输运中的重整化群

一、引言

已发展出一些重整化群途径用来处理非平衡情形. 例如, 实时重整化群方法 (RTRG) 以及它在频率空间中的重新表述 (RTRG-FS)(参见 Scholler H. Low-Dimension Systems, Lect. Notes Phys. Berlin: Spinger, 2000; Scholler H. Eur. Phys. J. Special Topics, 2009, 168:179–266), 它们提供了非平衡定态中的可观测量和关联函数的系统的自洽的处理, 也能容许对瞬变动力学的描述. 此外还有包括微扰重整化

群的非平衡推广、流方程途径、着眼于 Callan-Symanzik 方程的场论重整化群途径 (参见 Kaminski A, et al. Phys. Rev. B, 2000, 62:8154；Kehrein S. Phys.Rev. Lett., 95: 056602；Doyon B, Andrei N. Phys. Rev.B, 2006, 73:245326), 以及泛函重整化群途径等解析方法. 除解析方法外还有与时间有关的数值重整化群 (TD-NRG) 以及与时间有关的密度矩阵重整化群 (TD–MRG)(参见 Anders F B, Schiller A. Phys. Rev. Lett., 2005, 95:196801; White S R, Feiguin A E. Phys. Rev. Lett., 2004, 93: 076401) 等数值方法也已用于处理非平衡情形.

本节我们仅讨论这样一种解析途径, 即**泛函重整化群 (fRG)**, 它可以用于输运问题.

在 RG 途径中, 人们通常从高能标 (或大动量) 开始, 不考虑可能的红外发散, 用一种系统的方式运行到所希望的低能区 (或小动量区). 但这种系统的方式一般依赖于所研究的问题. 然而有两个不同方案试图以一个不依赖于具体问题的方式来运行. 一个方案是 Wegner 的以哈密顿为基础的 “流方程” 方法 (参见 Wegner F. Ann. Phys.,1994, 3:77), 其中的哈密顿被连续的幺正变换对角化, 但这种方法不易应用到可观测量 (如电导) 的计算上.

另一个方案是我们本节要讨论的如下的场论途径 —— 泛函重整化群途径, 它是建立在体系的配分函数的泛函积分表示 (路径积分表示) 上的. fRG 程序能导出单粒子不可约顶角函数的无限层次的流方程组, 这个方程组的解能给出 n 粒子格林函数. 在我们所讨论的途径中, 它可以通过将自由传播子用依赖于一个红外截断 Λ 的传播子来代替, 然后取生成泛函对 Λ 的导数的方法来导出. 由于无限层次的流方程组不能精确求解, 所以必须用某种适当的截断方案. 本节采用的方案是建立在不可约顶角函数的生成泛函按外源场的幂次来展开的基础上的.

正如第四章中所指出, 在平衡问题中, 我们可以在虚时轴上来表述问题. 此时体系的配分函数可以表述成

$$Z = \int \mathfrak{D}[\psi\bar{\psi}] \exp\{-S\} \tag{8.8.1}$$

其中, 作用量 (参见式 (7.3.37) 和式 (7.3.40)) 可以写成

$$S = -\left(\bar{\psi}, [g^0]^{-1}\psi\right) + S_{\text{int}}\left(\bar{\psi}, \psi\right) \tag{8.8.2}$$

式中

$$\left(\bar{\psi}, [g^0]^{-1}\psi\right) \equiv \sum_{\xi\xi'} \bar{\psi}(\xi)[g^0]^{-1}(\xi, \xi')\psi(\xi') \tag{8.8.3}$$

其中, ξ 代表单粒子态量子数集合和时间 t(或频率 ω, 因为在作傅里叶变换后, 时间 t 将被频率 ω 代替), 这里仍然采用对连续变量 (或连续指标) 的求和应理解成积分

的约定; $S_{\text{int}}\left(\bar{\psi},\psi\right)$ 代表相互作用部分, 场量 ψ 或者代表费米子的 Grassman 变量或者代表玻色子的复变量. 不过本节将直接讨论输运问题中的表述形式, 而不再专门给出平衡问题中的形式, 后者的形式更为简单且与前者只有一些较小的区别 (这在以后将指出), 何况两者的泛函重整化群中的流方程组的建立方法基本相似.

在非平衡问题中, 我们可以在实时轴上通过 Keldysh 回路 (又称 Schwinger 的双时回路) 来表述问题. 此时配分函数的路径积分可以表示为

$$\frac{Z}{Z_0}=\frac{1}{Z_0}\int\mathfrak{D}[\bar{\psi}\psi]\mathrm{e}^{\mathrm{i}S}=\frac{1}{Z_0}\int\mathfrak{D}[\bar{\psi}\psi]\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\bar{\psi},[G^0]^{-1}\psi)-\mathrm{i}S_{\text{int}}(\bar{\psi},\psi)}\tag{8.8.4}$$

其中, Z_0 为无相互作用时的配分函数, 以后为了避免泛函行列式, 考虑 Z/Z_0 而不是考虑 Z. 与平衡情形所不同的是, 此时

$$\psi\equiv\begin{pmatrix}\psi_+\\\psi_-\end{pmatrix},\quad G^0\equiv\begin{pmatrix}G^{0++}&G^{0+-}\\G^{0-+}&G^{0--}\end{pmatrix}\tag{8.8.5}$$

分别是用 Keldysh 列矩阵表示的场量和用 Keldysh 方阵表示的自由传播子. ψ_+ 的时间是在 Keldysh 回路的上半支 C_+ 上, ψ_- 的时间是在下半支 C_- 上.

$$(\bar{\psi},[G^0]^{-1}\psi)\equiv\sum_{\xi\xi'}\bar{\psi}(\xi)[G^0]^{-1}(\xi,\xi')\psi(\xi')\tag{8.8.6}$$

当引入外源场 η 和 $\bar{\eta}$ 时, 就可以得到格林函数的生成泛函:

$$Z[\bar{\eta},\eta]\equiv\frac{1}{Z_0}\int\mathfrak{D}[\bar{\psi}\psi]\mathrm{e}^{\mathrm{i}[(\bar{\psi},[G^0]^{-1}\psi)-S_{int}(\bar{\psi},\psi)-(\bar{\psi},\eta)-(\bar{\eta},\psi)]}\tag{8.8.7}$$

由于它生成的格林函数中包含不连通图, 所以我们引入所谓连通格林函数的生成泛函:

$$W[\bar{\eta},\eta]\equiv\ln Z[\bar{\eta},\eta]\tag{8.8.8}$$

n 粒子连通格林函数 $G_n^{(\mathrm{c})}(\{\xi_j'\},\{\xi_j\})$ 可以通过对生成泛函求泛函导数来得到:

$$G_n^{(\mathrm{c})}(\xi_1',\xi_2',\cdots,\xi_n';\xi_1,\xi_2,\cdots,\xi_n)=(\zeta\mathrm{i})^n\left.\frac{\delta^{2n}W[\bar{\eta},\eta]}{\delta\bar{\eta}_{\xi_1'}\delta\xi\overline{\eta}_{\xi_2'}\cdots\delta\bar{\eta}_{\xi_n'}\delta\eta_{\xi_n}\cdots\delta\eta_{\xi_2}\delta\eta_{\xi_1}}\right|_{\bar{\eta}=\eta=0}\tag{8.8.9}$$

其中, $\eta_{\xi_n}\equiv\eta(\xi_n)$. 注意在式 (8.8.7) 中, 我们引入了一个因子 $1/Z_0$(不是有些作者所用的因子 $1/Z$), 显然这类因子不会改变 $n\geqslant 1$ 时的 n 粒子连通格林函数 $G_n^{(\mathrm{c})}$.

利用在无对称破缺无外源时, 单个场量的期待值为零, 则不难验证式 (8.8.9) 给出通常的单粒子格林函数的定义:

$$\begin{aligned}G_1^{(\mathrm{c})}(\xi',\xi) &= \zeta\mathrm{i}\frac{\delta^2}{\delta\bar{\eta}_{\xi'}\delta\eta_\xi}\,W[\bar{\eta},\eta]|_{\bar{\eta}=\eta=0}\\&=(-\mathrm{i})\frac{1}{Z}\int\mathcal{D}[\bar{\psi}\psi]\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\bar{\psi},[G^0]^{-1}\psi)-\mathrm{i}S_{\mathrm{int}}(\bar{\psi},\psi)}\psi(\xi')\bar{\psi}(\xi)\\&\equiv -\mathrm{i}\langle\psi(\xi')\bar{\psi}(\xi)\rangle\end{aligned} \tag{8.8.10}$$

同样有

$$G_n^{(\mathrm{c})}(\xi_1',\xi_2',\cdots,\xi_n';\xi_1,\xi_2,\cdots,\xi_n) = (-\mathrm{i})^n\langle\psi_{\xi_1'}\psi_{\xi_2'}\cdots\psi_{\xi_n'}\bar{\psi}_{\xi_n}\cdots\bar{\psi}_{\xi_2}\bar{\psi}_{\xi_1}\rangle \tag{8.8.11}$$

其中, $\psi_\xi\equiv\psi(\xi)$. 由 $W[\bar{\eta},\eta]$ 虽然能够消去相连图, 但仍有单粒子可约图存在. 这些单粒子线只传递外动量, 不带来新的积分, 因此不会包含新内容, 应当消去, 并且 $W[\bar{\eta},\eta]$ 与 $Z[\bar{\eta},\eta]$ 一样, 虽然皆为 $\bar{\eta},\eta$ 的泛函, 但对 $\bar{\eta},\eta$ 的依赖关系并不明显. 如果我们进一步对 $W[\bar{\eta},\eta]$ 作勒让德变换, 就能消去单粒子可约图. 为此定义新的场:

$$\varphi_\xi = \mathrm{i}\frac{\delta}{\delta\bar{\eta}_\xi}W[\bar{\eta},\eta] = \langle\psi_\xi\rangle_{\eta,\bar{\eta}} \tag{8.8.12}$$

以及

$$\bar{\varphi}_\xi = \zeta\mathrm{i}\frac{\delta}{\delta\eta_\xi}W[\bar{\eta},\eta] = \langle\bar{\psi}_\xi\rangle_{\eta,\bar{\eta}} \tag{8.8.13}$$

其中, $\langle\cdots\rangle_{\eta,\bar{\eta}}$ 代表有源 $\bar{\eta},\eta$ 时的平均值. 注意在计算导数后, 源场 $\bar{\eta},\eta$ 保持为有限的值. 如果 $\bar{\eta},\eta$ 取零, 则在我们所讨论的无对称破缺无源情形, φ_ξ 和 $\bar{\varphi}_\xi$ 就为零了. 由上述定义式知, φ_ξ 和 $\bar{\varphi}_\xi$ 一般依赖于所有的 $\bar{\eta}_\nu,\eta_\nu$.

单粒子不可约顶角函数的生成泛函由如下勒让德变换定义为

$$\Gamma[\bar{\varphi},\varphi] = -W[\bar{\eta},\eta]-\mathrm{i}(\bar{\eta},\varphi)-\mathrm{i}(\bar{\varphi},\eta)+\mathrm{i}(\bar{\varphi},[G^0]^{-1}\varphi) \tag{8.8.14}$$

其中, 与通常的勒让德变换不同 (为了以后的方便), 在上式右边加了最后一项. 利用式 (8.8.12)∼ 式 (8.8.14) 可得

$$\begin{aligned}\frac{\delta}{\delta\varphi_\xi}\Gamma[\bar{\varphi},\varphi] =& -\sum_\nu\left(\frac{\delta W}{\delta\eta_\nu}\frac{\delta\eta_\nu}{\delta\varphi_\xi}+\frac{\delta W}{\delta\bar{\eta}_\nu}\frac{\delta\bar{\eta}_\nu}{\delta\varphi_\xi}\right)-\mathrm{i}\zeta\bar{\eta}_\xi\\&-\mathrm{i}\sum_\nu\frac{\delta\bar{\eta}_\nu}{\delta\varphi_\xi}\varphi_\nu-\mathrm{i}\zeta\sum_\nu\bar{\varphi}_\nu\frac{\delta\eta_\nu}{\delta\varphi_\xi}+\mathrm{i}\zeta\sum_\nu\bar{\varphi}_\nu[G^0]^{-1}_{\nu\xi}\\=&-\mathrm{i}\zeta\bar{\eta}_\xi+\mathrm{i}\zeta\sum_\nu\bar{\varphi}_\nu[G^0]^{-1}_{\nu\xi}\end{aligned} \tag{8.8.15}$$

同样可得

$$\frac{\delta}{\delta\bar{\varphi}_\xi}\Gamma[\bar{\varphi},\varphi]=-\mathrm{i}\eta_\xi+\mathrm{i}\sum_\nu[G^0]^{-1}_{\xi\nu}\varphi_\nu \tag{8.8.16}$$

定义 n 粒子顶角函数为

$$\gamma_n(\xi'_1,\xi'_2,\cdots,\xi'_n;\xi_1,\xi_2,\cdots,\xi_n)=\mathrm{i}^{-n}\frac{\delta^{2n}}{\delta\bar{\varphi}_{\xi'_1}\delta\bar{\varphi}_{\xi'_2}\cdots\delta\bar{\varphi}_{\xi'_n}\delta\varphi_{\xi_n}\cdots\delta\varphi_{\xi_2}\delta\varphi_{\xi_1}}\Gamma[\bar{\varphi},\varphi]|_{\bar{\varphi}=0=\varphi} \tag{8.8.17}$$

注意：系数 i^{-n} 的引入是为了让 γ_1 与自能之间满足式 (8.8.20).

现在我们来导出单粒子函数之间的关系：

$$\begin{aligned}
\delta_{\xi\xi'}=\frac{\delta\bar{\varphi}_\xi}{\delta\bar{\varphi}_{\xi'}}&=\zeta\mathrm{i}\frac{\delta}{\delta\bar{\varphi}_{\xi'}}\frac{\delta}{\delta\eta_\xi}W[\bar{\eta},\eta]\\
&=\zeta\mathrm{i}\sum_\nu\left[\frac{\delta\eta_\nu}{\delta\bar{\varphi}_{\xi'}}\frac{\delta^2W}{\delta\eta_\nu\delta\eta_\xi}+\frac{\delta\bar{\eta}_\nu}{\delta\bar{\varphi}_{\xi'}}\frac{\delta^2W}{\delta\bar{\eta}_\nu\delta\eta_\xi}\right]\\
&=\sum_\nu\left[\left(\mathrm{i}\frac{\delta^2\Gamma}{\delta\bar{\varphi}_{\xi'}\delta\varphi_\nu}+\zeta[G^0]^{-1}_{\xi'\nu}\right)\mathrm{i}\frac{\delta^2W}{\delta\bar{\eta}_\nu\delta\eta_\xi}+\mathrm{i}\frac{\delta^2\Gamma}{\delta\bar{\varphi}_{\xi'}\delta\bar{\varphi}_\nu}\mathrm{i}\frac{\delta^2W}{\delta\eta_\nu\delta\eta_\xi}\right]
\end{aligned}$$

类似地再分别利用

$$\frac{\delta\varphi_\xi}{\delta\varphi_{\xi'}}=\delta_{\xi\xi'},\quad\frac{\delta\varphi_\xi}{\delta\bar{\varphi}_{\xi'}}=0,\quad\frac{\delta\bar{\varphi}_\xi}{\delta\varphi_{\xi'}}=0$$

可得

$$\sum_\nu\left[\left(\mathrm{i}\frac{\delta^2\Gamma}{\delta\varphi_{\xi'}\delta\bar{\varphi}_\nu}+[G^0]^{-1}_{\nu\xi'}\right)\mathrm{i}\frac{\delta^2W}{\delta\eta_\nu\delta\bar{\eta}_\xi}+\mathrm{i}\frac{\delta^2\Gamma}{\delta\varphi_{\xi'}\delta\varphi_\nu}\mathrm{i}\zeta\frac{\delta^2W}{\delta\bar{\eta}_\nu\delta\bar{\eta}_\xi}\right]=\delta_{\xi\xi'}$$

$$\sum_\nu\left[\left(\mathrm{i}\frac{\delta^2\Gamma}{\delta\bar{\varphi}_{\xi'}\delta\varphi_\nu}+[G^0]^{-1}_{\xi'\nu}\right)\mathrm{i}\zeta\frac{\delta^2W}{\delta\bar{\eta}_\nu\delta\bar{\eta}_\xi}+\mathrm{i}\frac{\delta^2\Gamma}{\delta\bar{\varphi}_{\xi'}\delta\bar{\varphi}_\nu}\mathrm{i}\frac{\delta^2W}{\delta\eta_\nu\delta\bar{\eta}_\xi}\right]=0$$

$$\sum_\nu\left[\left(\mathrm{i}\frac{\delta^2\Gamma}{\delta\varphi_{\xi'}\delta\bar{\varphi}_\nu}+[G^0]^{-1}_{\nu\xi'}\right)\mathrm{i}\zeta\frac{\delta^2W}{\delta\eta_\nu\delta\eta_\xi}+\mathrm{i}\frac{\delta^2\Gamma}{\delta\varphi_{\xi'}\delta\varphi_\nu}\mathrm{i}\frac{\delta^2W}{\delta\bar{\eta}_\nu\delta\eta_\xi}\right]=0$$

上述几个关系式可以写成如下紧致的矩阵形式：

$$\begin{pmatrix}\mathrm{i}\dfrac{\delta^2\Gamma}{\delta\bar{\varphi}\delta\varphi}+\zeta[G^0]^{-1} & \mathrm{i}\dfrac{\delta^2\Gamma}{\delta\bar{\varphi}\delta\bar{\varphi}}\\ \mathrm{i}\dfrac{\delta^2\Gamma}{\delta\varphi\delta\varphi} & \mathrm{i}\dfrac{\delta^2\Gamma}{\delta\varphi\delta\bar{\varphi}}+[G^0]^{-1,t}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\mathrm{i}\dfrac{\delta^2W}{\delta\bar{\eta}\delta\eta} & \mathrm{i}\zeta\dfrac{\delta^2W}{\delta\bar{\eta}\delta\bar{\eta}}\\ \mathrm{i}\zeta\dfrac{\delta^2W}{\delta\eta\delta\eta} & \mathrm{i}\dfrac{\delta^2W}{\delta\eta\delta\bar{\eta}}\end{pmatrix}=1 \tag{8.8.18}$$

其中, 指标 t 表示转置. 当无对称破缺相时, 若取外源为零, 则有

$$\left.\frac{\delta^2 W}{\delta\eta\delta\eta}\right|_{\eta=0=\bar{\eta}} = \left.\frac{\delta^2 W}{\delta\bar{\eta}\delta\bar{\eta}}\right|_{\eta=0=\bar{\eta}} = 0$$

$$\left.\frac{\delta^2 \Gamma}{\delta\varphi\delta\varphi}\right|_{\varphi=0=\bar{\varphi}} = \left.\frac{\delta^2 \Gamma}{\delta\bar{\varphi}\delta\bar{\varphi}}\right|_{\varphi=0=\bar{\varphi}} = 0$$

故由式 (8.8.18) 可得

$$\zeta\mathrm{i}\left.\frac{\delta^2 W}{\delta\bar{\eta}_{\xi'}\delta\eta_{\xi}}\right|_{\bar{\eta}=0=\eta} = \zeta\left(\mathrm{i}\left.\frac{\delta^2\Gamma}{\delta\bar{\varphi}\delta\varphi}\right|_{\bar{\varphi}=0=\varphi} + \zeta[G^0]^{-1}\right)^{-1}_{\xi'\xi}$$

此即

$$G_1^{\mathrm{c}}(\xi',\xi) = \left(-\zeta\gamma_1 + [G^0]^{-1}\right)^{-1} \tag{8.8.19}$$

又因有如下泊松方程:

$$G_1^{\mathrm{c}}(\xi',\xi) = \left([G^0]^{-1} - \varSigma\right)^{-1}_{\xi'\xi}$$

所以知

$$\varSigma = \zeta\gamma_1 \tag{8.8.20}$$

二、输运中的泛函重整化群

现在我们来导出泛函重整化群中的流方程组. 为此需要在式 (8.8.7) 和式 (8.8.8) 中将自由传播子 G^0 用一个依赖于截断 $\varLambda$ 的传播子 $G^{0,\varLambda}$ 代替. 其中 $\varLambda\in[0,\varLambda_0]$, 并且要求

$$G^{0,\varLambda_0} = 0, \quad G^{0,\varLambda=0} = G^0 \tag{8.8.21}$$

这样有

$$Z^{\varLambda}[\bar{\eta},\eta] \equiv \frac{1}{Z_0^{\varLambda}}\int \mathfrak{D}[\bar{\psi}\psi]\mathrm{e}^{\mathrm{i}[(\bar{\psi},[G^{0,\varLambda}]^{-1}\psi)-S_{\mathrm{int}}(\bar{\psi},\psi)-(\bar{\psi},\eta)-(\bar{\eta},\psi)]} \tag{8.8.22}$$

其中, $Z_0^{\varLambda}$是将无相互作用配分函数 Z_0 中的 G^0 用 $G^{0,\varLambda}$ 代替来得到的. 将$W^{\varLambda}[\bar{\eta},\eta]\equiv \ln Z^{\varLambda}[\bar{\eta},\eta]$ 对 $\varLambda$ 求导得

$$\dot{W}^{\varLambda} \equiv \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varLambda}W^{\varLambda}$$

$$= \frac{1}{Z^\Lambda}\int \mathfrak{D}[\bar{\psi}\psi]\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\Lambda}\left[\frac{1}{Z_0^\Lambda}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\bar{\psi},[G^{0,\Lambda}]^{-1}\psi)}\right]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}S_{\mathrm{int}}(\bar{\psi},\psi)-\mathrm{i}(\bar{\psi},\eta)-\mathrm{i}(\bar{\eta},\psi)} \quad (8.8.23)$$

因为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\Lambda}\left[\frac{1}{Z_0^\Lambda}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\bar{\psi},[G^{0,\Lambda}]^{-1}\psi)}\right] = -\frac{1}{(Z_0^\Lambda)^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\bar{\psi},[G^{0,\Lambda}]^{-1}\psi)}\int \mathfrak{D}[\bar{\psi}\psi]\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\bar{\psi},[G^{0,\Lambda}]^{-1}\psi)}\mathrm{i}(\bar{\psi},[\dot{G}^{0,\Lambda}]^{-1}\psi)$$
$$+\frac{1}{Z_0^\Lambda}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\bar{\psi},[G^{0,\Lambda}]^{-1}\psi)}\mathrm{i}(\bar{\psi},[\dot{G}^{0,\Lambda}]^{-1}\psi)$$

其中, $[\dot{G}^{0,\Lambda}]^{-1}\equiv\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\Lambda}[G^{0,\Lambda}]^{-1}$. 又因

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{Z_0^\Lambda}\int \mathfrak{D}[\bar{\psi}\psi]\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\bar{\psi},[G^{0,\Lambda}]^{-1}\psi)}\mathrm{i}(\bar{\psi},[\dot{G}^{0,\Lambda}]^{-1}\psi)\\
&=\sum_{\xi\xi',\alpha\beta}[\dot{G}^{0,\Lambda}]^{-1,\alpha\beta}_{\xi\xi'}\zeta\frac{1}{Z_0^\Lambda}\int \mathfrak{D}[\bar{\psi}\psi]\mathrm{i}\psi_{\xi'\beta}\bar{\psi}_{\xi\alpha}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\bar{\psi},[G^{0,\Lambda}]^{-1}\psi)}\\
&=-\zeta\mathrm{tr}\left([\dot{G}^{0,\Lambda}]^{-1}G^{0,\Lambda}\right)
\end{aligned}$$

其中, Keldysh 指标 α,β 取 $+$ 或 $-$. 所以

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\Lambda}\left[\frac{1}{Z_0^\Lambda}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\bar{\psi},[G^{0,\Lambda}]^{-1}\psi)}\right]=\frac{1}{Z_0^\Lambda}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\bar{\psi},[G^{0,\Lambda}]^{-1}\psi)}\times\left[\mathrm{i}(\bar{\psi},[\dot{G}^{0,\Lambda}]^{-1}\psi)+\zeta\mathrm{tr}\left([\dot{G}^{0,\Lambda}]^{-1}G^{0,\Lambda}\right)\right] \quad (8.8.24)$$

将式 (8.8.24) 代入式 (8.8.23) 中得

$$\dot{W}^\Lambda=\zeta\mathrm{tr}\left([\dot{G}^{0,\Lambda}]^{-1}G^{0,\Lambda}\right)-\mathrm{i}\zeta\frac{1}{Z^\Lambda}\left(\frac{\delta}{\delta\eta},[\dot{G}^{0,\Lambda}]^{-1}\frac{\delta}{\delta\bar{\eta}}\right)Z^\Lambda \quad (8.8.25)$$

再利用

$$\begin{aligned}
&-\mathrm{i}\zeta\frac{1}{Z^\Lambda}\left(\frac{\delta}{\delta\eta},[\dot{G}^{0,\Lambda}]^{-1}\frac{\delta}{\delta\bar{\eta}}\right)Z^\Lambda\\
&=-\mathrm{i}\zeta\mathrm{e}^{-W^\Lambda}\left(\frac{\delta}{\delta\eta},[\dot{G}^{0,\Lambda}]^{-1}\frac{\delta}{\delta\bar{\eta}}\right)\mathrm{e}^{W^\Lambda}\\
&=-\mathrm{i}\zeta\mathrm{e}^{-W^\Lambda}\sum_{\xi\xi'}[\dot{G}^{0,\Lambda}]^{-1}_{\xi\xi'}\frac{\delta}{\delta\eta_\xi}\left(\mathrm{e}^{W^\Lambda}\frac{\delta W^\Lambda}{\delta\bar{\eta}_{\xi'}}\right)\\
&=-\mathrm{i}\zeta\left(\frac{\delta W^\Lambda}{\delta\eta},[\dot{G}^{0,\Lambda}]^{-1}\frac{\delta W^\Lambda}{\delta\bar{\eta}}\right)-\mathrm{itr}\left([\dot{G}^{0,\Lambda}]^{-1}\frac{\delta^2 W^\Lambda}{\delta\bar{\eta}\delta\eta}\right)
\end{aligned}$$

这样我们得到 W^Λ 所满足的微分方程:

$$\dot{W}^\Lambda=\zeta\mathrm{tr}\left([\dot{G}^{0,\Lambda}]^{-1}G^{0,\Lambda}\right)-\mathrm{i}\zeta\left(\frac{\delta W^\Lambda}{\delta\eta},[\dot{G}^{0,\Lambda}]^{-1}\frac{\delta W^\Lambda}{\delta\bar{\eta}}\right)$$

$$-\operatorname{itr}\left([\dot{G}^{0,\Lambda}]^{-1}\frac{\delta^2 W^\Lambda}{\delta\bar{\eta}\delta\eta}\right) \tag{8.8.26}$$

Γ 的基本变量是 $\bar{\varphi},\varphi$, 从式 (8.8.15) 和式 (8.8.16) 知, $\bar{\eta},\eta$ 将依赖于 Λ. 故

$$\dot{\Gamma}^\Lambda[\bar{\varphi},\varphi]=-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\Lambda}W^\Lambda[\bar{\eta}^\Lambda,\eta^\Lambda]-\mathrm{i}(\dot{\bar{\eta}}^\Lambda,\varphi)-\mathrm{i}(\bar{\varphi},\dot{\eta}^\Lambda)+\mathrm{i}(\bar{\varphi},[\dot{G}^{0,\Lambda}]^{-1}\varphi) \tag{8.8.27}$$

其中

$$\begin{aligned}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\Lambda}W^\Lambda[\bar{\eta}^\Lambda,\eta^\Lambda]&=-\dot{W}^\Lambda[\bar{\eta}^\Lambda,\eta^\Lambda]-\frac{\mathrm{d}\bar{\eta}^\Lambda}{\mathrm{d}\Lambda}\frac{\delta W^\Lambda}{\delta\bar{\eta}^\Lambda}-\frac{\mathrm{d}\eta^\Lambda}{\mathrm{d}\Lambda}\frac{\delta W^\Lambda}{\delta\eta^\Lambda}\\&=-\dot{W}^\Lambda[\bar{\eta}^\Lambda,\eta^\Lambda]+\mathrm{i}(\dot{\bar{\eta}}^\Lambda,\varphi)+\mathrm{i}(\bar{\varphi},\dot{\eta}^\Lambda)\end{aligned} \tag{8.8.28}$$

在利用链法则求导时, 要注意内层导数和外层导数的次序 (对于费米子情形), 容易验证内层导数应该放在外层导数的左侧, 正如上式所表示的那样. 另外, $\dot{W}^\Lambda$ 上的求导仅是外层导数, 所以

$$\begin{aligned}\dot{\Gamma}^\Lambda[\bar{\varphi},\varphi]&=-\dot{W}^\Lambda[\bar{\eta}^\Lambda,\eta^\Lambda]+\mathrm{i}(\bar{\varphi},[\dot{G}^{0,\Lambda}]^{-1}\varphi)\\&=-\zeta\operatorname{tr}\left([\dot{G}^{0,\Lambda}]^{-1}G^{0,\Lambda}\right)+\operatorname{itr}\left([\dot{G}^{0,\Lambda}]^{-1}\frac{\delta^2 W^\Lambda}{\delta\bar{\eta}\delta\eta}\right)\end{aligned} \tag{8.8.29}$$

其中, 式 (8.8.27) 中最后一项被消去了, 这是在式 (8.8.14) 中加上最后一项的原因.

我们根据式 (8.8.18), 引入矩阵

$$V_{\bar{\varphi}\varphi}(\Gamma,G^0)=\mathrm{i}\begin{pmatrix}\dfrac{\delta^2 W}{\delta\bar{\eta}\delta\eta} & \zeta\dfrac{\delta^2 W}{\delta\bar{\eta}\delta\bar{\eta}}\\ \zeta\dfrac{\delta^2 W}{\delta\eta\delta\eta} & \dfrac{\delta^2 W}{\delta\eta\delta\bar{\eta}}\end{pmatrix} \tag{8.8.30}$$

其中, 左上块记为 $V^{1,1}_{\bar{\varphi}\varphi}(\Gamma,G^0)$. 则在 Λ 参数化后, 可将式 (8.8.29) 写成

$$\dot{\Gamma}^\Lambda[\bar{\varphi},\varphi]=-\zeta\operatorname{tr}\left([\dot{G}^{0,\Lambda}]^{-1}G^{0,\Lambda}\right)+\operatorname{tr}\left([\dot{G}^{0,\Lambda}]^{-1}V^{1,1}_{\bar{\varphi}\varphi}(\Gamma^\Lambda,G^{0,\Lambda})\right) \tag{8.8.31}$$

为了得到关于 γ_n^Λ 的微分方程, 我们借助于 G^Λ 而不是 $G^{0,\Lambda}$ 来表达 $V_{\bar{\varphi}\varphi}$. 再引入 $U_{\bar{\varphi}\varphi}$, 令

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\frac{\delta^2\Gamma^\Lambda}{\delta\bar{\varphi}\delta\varphi}+\zeta[G^{0,\Lambda}]^{-1}&=-\gamma_1^\Lambda+U_{\bar{\varphi}\varphi}+\zeta[G^{0,\Lambda}]^{-1}\\&=\zeta\left(-\Sigma^\Lambda+[G^{0,\Lambda}]^{-1}\right)+U_{\bar{\varphi}\varphi}=\zeta[G^\Lambda]^{-1}+U_{\bar{\varphi}\varphi}\end{aligned} \tag{8.8.32}$$

其中

$$U_{\bar{\varphi}\varphi}=\mathrm{i}\frac{\delta^2\Gamma^\Lambda}{\delta\bar{\varphi}\delta\varphi}+\gamma_1^\Lambda \tag{8.8.33}$$

$$G^{\Lambda}=\left([G^{0,\Lambda}]^{-1}-\Sigma^{\Lambda}\right)^{-1} \tag{8.8.34}$$

利用式 (8.8.32) 及式 (8.8.18), 我们得到

$$\begin{aligned}V_{\bar{\varphi}\varphi}(\Gamma^{\Lambda},G^{0,\Lambda})=&\left[\begin{pmatrix}\zeta[G^{\Lambda}]^{-1} & 0\\ 0 & [G^{\Lambda}]^{-1,t}\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}U_{\bar{\varphi}\varphi} & \mathrm{i}\dfrac{\delta^2\Gamma^{\Lambda}}{\delta\bar{\varphi}\delta\bar{\varphi}}\\ \mathrm{i}\dfrac{\delta^2\Gamma^{\Lambda}}{\delta\varphi\delta\varphi} & \zeta U^t_{\bar{\varphi}\varphi}\end{pmatrix}\right]^{-1}\\ =&\left[1-\begin{pmatrix}\zeta[G^{\Lambda}] & 0\\ 0 & [G^{\Lambda}]^{t}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}U_{\bar{\varphi}\varphi} & \mathrm{i}\dfrac{\delta^2\Gamma^{\Lambda}}{\delta\bar{\varphi}\delta\bar{\varphi}}\\ \mathrm{i}\dfrac{\delta^2\Gamma^{\Lambda}}{\delta\varphi\delta\varphi} & \zeta U^t_{\bar{\varphi}\varphi}\end{pmatrix}\right]^{-1}\begin{pmatrix}\zeta[G^{\Lambda}] & 0\\ 0 & [G^{\Lambda}]^{t}\end{pmatrix}\\ \equiv&\tilde{V}_{\bar{\varphi}\varphi}(\Gamma^{\Lambda},G^{\Lambda})\begin{pmatrix}\zeta[G^{\Lambda}] & 0\\ 0 & [G^{\Lambda}]^{t}\end{pmatrix}\end{aligned} \tag{8.8.35}$$

代入式 (8.8.31) 中得

$$\dot{\Gamma}^{\Lambda}[\bar{\varphi},\varphi]=-\zeta\mathrm{tr}\left([\dot{G}^{0,\Lambda}]^{-1}G^{0,\Lambda}\right)+\zeta\mathrm{tr}\left(G^{\Lambda}[\dot{G}^{0,\Lambda}]^{-1}\tilde{V}^{1,1}_{\bar{\varphi}\varphi}(\Gamma^{\Lambda},G^{\Lambda})\right) \tag{8.8.36}$$

为了给出 $\tilde{V}_{\bar{\varphi}\varphi}(\Gamma^{\Lambda},G^{\Lambda})$ 与 $\Gamma^{\Lambda},G^{\Lambda}$ 之间更明显的关系, 我们展开 $\tilde{V}_{\bar{\varphi}\varphi}$ 成几何级数, 从而有

$$\tilde{V}^{1,1}_{\bar{\varphi}\varphi}(\Gamma^{\Lambda},G^{\Lambda})=1+\zeta G^{\Lambda}+G^{\Lambda}U_{\bar{\varphi}\varphi}G^{\Lambda}U_{\bar{\varphi}\varphi}-\zeta G^{\Lambda}\frac{\delta^2\Gamma^{\Lambda}}{\delta\bar{\varphi}\delta\bar{\varphi}}[G^{\Lambda}]^t\frac{\delta^2\Gamma^{\Lambda}}{\delta\varphi\delta\varphi}+\cdots \tag{8.8.37}$$

为了导出 n 粒子顶角函数所满足的微分方程, 将 Γ^{Λ} 展开成外源的泰勒级数

$$\Gamma^{\Lambda}[\bar{\varphi},\varphi]=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\mathrm{i}\zeta)^n}{(n!)^2}\sum_{\xi_1'\xi_2'\cdots\xi_n'}\sum_{\xi_1\xi_2\cdots\xi_n}\gamma_n^{\Lambda}(\xi_1'\xi_2'\cdots\xi_n';\xi_1\xi_2\cdots\xi_n)\bar{\varphi}_{\xi_1'}\varphi_{\xi_2'}\cdots\bar{\varphi}_{\xi_n'}\varphi_{\xi_n}\cdots\varphi_{\xi_2}\varphi_{\xi_1} \tag{8.8.38}$$

其中, 展开系数 γ_n^{Λ} 为 n 粒子顶角函数. 将式 (8.8.38) 代入式 (8.8.36) 两边并比较 φ 和 $\bar{\varphi}$ 的幂次 (注意: $U_{\bar{\varphi}\varphi}$、$\dfrac{\delta^2\Gamma^{\Lambda}}{\delta\bar{\varphi}\delta\bar{\varphi}}$ 和 $\dfrac{\delta^2\Gamma^{\Lambda}}{\delta\varphi\delta\varphi}$ 至少是外源的二次式), 就能得到 γ_n^{Λ} 的一组无限层次的微分方程. 其中

$$\begin{aligned}\dot{\gamma}_0^{\Lambda}&=-\zeta\mathrm{tr}\left([\dot{G}^{0,\Lambda}]^{-1}G^{0,\Lambda}\right)+\zeta\mathrm{tr}\left(G^{\Lambda}[\dot{G}^{0,\Lambda}]^{-1}\right)\\ G^{\Lambda}&=\left[[G^{0,\Lambda}]^{-1}-\zeta\gamma_1^{\Lambda}\right]^{-1}\end{aligned} \tag{8.8.39}$$

这样, $\dot{\gamma}_0^{\Lambda}$ 的方程涉及 γ_1^{Λ}. 为了计算 $\dot{\gamma}_1^{\Lambda}$, 我们必须确定 $U_{\bar{\varphi}\varphi}$ 中含有 $\bar{\varphi}\varphi$ 的部分, 因

$$\Gamma^{\Lambda}=\gamma_0^{\Lambda}+\mathrm{i}\zeta\sum_{\xi'\xi}\gamma_1^{\Lambda}(\xi',\xi)\bar{\varphi}_{\xi'}\varphi_{\xi}-\frac{1}{4}\sum_{\xi_1'\xi_2'\xi_1\xi_2}\gamma_2^{\Lambda}(\xi_1'\xi_2';\xi_1\xi_2)\bar{\varphi}_{\xi'}\bar{\varphi}_{\xi_2'}\varphi_{\xi_2}\varphi_{\xi_1}+\cdots$$

其中

$$\gamma_2^\Lambda(\xi_1',\xi_2';\xi_1,\xi_2)=\zeta\gamma_2^\Lambda(\xi_2',\xi_1';\xi_1,\xi_2)=\zeta\gamma_2^\Lambda(\xi_1',\xi_2';\xi_2,\xi_1)$$

故

$$U_{\bar\varphi_{\nu'}\varphi_\nu}=\mathrm{i}\frac{\delta^2\Gamma^\Lambda}{\delta\bar\varphi_{\nu'}\delta\varphi_\nu}+\gamma_1^\Lambda(\nu',\nu)=-\zeta\mathrm{i}\gamma_2^\Lambda(\xi_1'\nu',\xi_1\nu)\bar\varphi_{\xi_1'}\varphi_{\xi_1}+\cdots$$

由此得

$$\dot\gamma_1^\Lambda(\xi',\xi)=\zeta\dot\Sigma^\Lambda(\xi',\xi)=-\mathrm{tr}\left(G^\Lambda[\dot G^{0,\Lambda}]^{-1}G^\Lambda\gamma_2^\Lambda(\xi',\cdot;\xi,\cdot)\right)\tag{8.8.40}$$

其中, $\gamma_2^\Lambda(\xi',\cdot;\xi,\cdot)$ 表示这样的矩阵, 其矩阵元为

$$[\gamma_2^\Lambda(\xi',\cdot;\xi,\cdot)]_{\nu',\nu}\equiv\gamma_2^\Lambda(\xi',\nu';\xi,\nu)\tag{8.8.41}$$

显然 $\dot\gamma_1^\Lambda$ 与 γ_1^Λ(或自能 Σ^Λ) 及两粒子顶角 γ_2^Λ 相耦合. 如果把式 (8.8.40) 的 Keldysh 指标明显表示出, 则有

$$\begin{aligned}[\dot\gamma_1^\Lambda(\xi',\xi)]^{\alpha'\alpha}&=\zeta\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\Lambda}\Sigma^{\alpha'\alpha,\Lambda}(\xi',\xi)\\&=-\mathrm{tr}\sum_{\beta\beta'}S^{\beta\beta',\Lambda}\gamma_2^{\alpha'\beta'\alpha\beta,\Lambda}(\xi',\cdot;\xi,\cdot)\end{aligned}\tag{8.8.42}$$

其中, $S^\Lambda\equiv G^\Lambda[\dot G^{0,\Lambda}]^{-1}G^\Lambda$ 是**单标度传播子**. 可以把式 (8.8.40) 用图 8.8.1 表示. 其中, 有一划线的传播子线代表单标度传播子 S^Λ.



图 8.8.1　式 (8.8.40) 的图形表示

为了确定两粒子顶角 γ_2^Λ, 我们观察 $\dot\gamma_2^\Lambda$ 有两种不同的贡献. 第一种贡献来自 $\zeta G^\Lambda U_{\bar\varphi\varphi}$, 此时要确定 $U_{\bar\varphi\varphi}$ 中含外源的四次幂 $\bar\varphi_{\xi_1'}\bar\varphi_{\xi_2'}\varphi_{\xi_2}\varphi_{\xi_1}$ 的项, 其中含有 3 粒子顶角 γ_3^Λ.

$$\begin{aligned}&\mathrm{i}\frac{\delta^2}{\delta\bar\varphi_{\nu'}\delta\varphi_\nu}\frac{(\mathrm{i}\zeta)^3}{(3!)^2}\sum_{\xi_1'\xi_2'\xi_3'\xi_1\xi_2\xi_3}\gamma_3^\Lambda(\xi_1'\xi_2'\xi_3';\xi_1\xi_2\xi_3)\bar\varphi_{\xi_1'}\bar\varphi_{\xi_2'}\bar\varphi_{\xi_3'}\varphi_{\xi_3}\varphi_{\xi_2}\varphi_{\xi_1}\\&=\frac{1}{4}\sum_{\xi_1'\xi_2'\xi_1\xi_2}\gamma_3^\Lambda(\xi_1',\xi_2',\nu';\xi_1,\xi_2,\nu)\bar\varphi_{\xi_1'}\bar\varphi_{\xi_2'}\varphi_{\xi_2}\varphi_{\xi_1}\end{aligned}$$

第二种贡献来自式 (8.8.37) 中的第三项和第四项. 第四项中 $\dfrac{\delta^2\Gamma}{\delta\bar{\varphi}\delta\bar{\varphi}}$ 正比于 $\varphi_{\xi_2}\varphi_{\xi_1}$ 的贡献为

$$\begin{aligned}&\frac{\delta^2}{\delta\bar{\varphi}_{\nu_1'}\delta\bar{\varphi}_{\nu_2'}}\frac{(\mathrm{i}\zeta)^2}{(2!)^2}\sum_{\xi_1'\xi_2'\xi_1\xi_2}\gamma_2^{\Lambda}(\xi_1'\xi_2';\xi_1\xi_2)\bar{\varphi}_{\xi_1'}\bar{\varphi}_{\xi_2'}\varphi_{\xi_2}\varphi_{\xi_1}\\&=-\frac{\zeta}{2}\sum_{\xi_1\xi_2}\gamma_2^{\Lambda}(\nu_1'\nu_2';\xi_1\xi_2)\varphi_{\xi_2}\varphi_{\xi_1}\end{aligned}$$

第四项中 $\dfrac{\delta^2\Gamma}{\delta\varphi\delta\varphi}$ 正比于 $\bar{\varphi}_{\xi_1'}\bar{\varphi}_{\xi_2'}$ 的贡献为

$$\begin{aligned}&\frac{\delta^2}{\delta\varphi_{\nu_1}\delta\varphi_{\nu_2}}\frac{(i\zeta)^2}{(2!)^2}\sum_{\xi_1'\xi_2'\xi_1\xi_2}\gamma_2^{\Lambda}(\xi_1'\xi_2';\xi_1\xi_2)\bar{\varphi}_{\xi_1'}\bar{\varphi}_{\xi_2'}\varphi_{\xi_2}\varphi_{\xi_1}\\&=-\frac{1}{2}\sum_{\xi_1'\xi_2'}\gamma_2^{\Lambda}(\xi_1'\xi_2';\nu_1\nu_2)\bar{\varphi}_{\xi_1'}\bar{\varphi}_{\xi_2'}\end{aligned}$$

把所有这些考虑进去, 可得

$$\begin{aligned}\dot{\gamma}_2^{\Lambda}(\xi_1',\xi_2';\xi_1,\xi_2)=&-\operatorname{tr}\left(G^{\Lambda}[\dot{G}^{0,\Lambda}]^{-1}G^{\Lambda}\gamma_3^{\Lambda}(\xi_1',\xi_2',\cdot;\xi_1,\xi_2,\cdot)\right)\\&+\zeta\operatorname{tr}\left(G^{\Lambda}[\dot{G}^{0,\Lambda}]^{-1}G^{\Lambda}\gamma_2^{\Lambda}(\cdot,\cdot;\xi_1,\xi_2)[G^{\Lambda}]^{t}\gamma_2^{\Lambda}(\xi_1',\xi_2';\cdot,\cdot)\right)\\&+\zeta\operatorname{tr}\Big(G^{\Lambda}[\dot{G}^{0,\Lambda}]^{-1}G^{\Lambda}\gamma_2^{\Lambda}(\xi_1',\cdot;\xi_1,\cdot)G^{\Lambda}\gamma_2^{\Lambda}(\xi_2',\cdot;\xi_2,\cdot)\\&+\zeta[\xi_1'\leftrightarrow\xi_2']+\zeta[\xi_1\leftrightarrow\xi_2]+[\xi_1'\leftrightarrow\xi_2',\xi_1\leftrightarrow\xi_2]\Big)\end{aligned}\tag{8.8.43}$$

它的图形如图 8.8.2 所示. 由上看出, $\dot{\gamma}_2^{\Lambda}$ 又要和 γ_3^{Λ} 相耦合, 同样 $\dot{\gamma}_3^{\Lambda}$ 要和 γ_4^{Λ} 相耦合, 如此等, 我们将得到一个无限等级的方程组. 为了得到封闭的方程组, 可以采用截断近似. 通常大多数情形都近似取 γ_3^{Λ} 等于它的初始值 $\gamma_3^{\Lambda_0}$, 从而使得式 (8.8.40) 以及式 (8.8.43) 对于 γ_1^{Λ} 和 γ_2^{Λ} 是封闭的. 一旦确定了 γ_1^{Λ}, 就可以由式 (8.8.39) 直接求出 γ_0^{Λ}.

现在我们来讨论求解流方程组所必需施加的初始条件. 首先, 由于在 $\Lambda=\Lambda_0$ 时, 未开启自由传播子的任何自由度, 所以有式 (8.8.21) 的初始条件:

$$G^{0,\Lambda_0}=0$$

并且在 $\gamma_n^{\Lambda_0}$ 的微扰展开中, 仅有的不为零的项是裸二粒子顶角, 故有

$$\Gamma^{\Lambda_0}[\bar{\varphi},\varphi]=S_{\text{int}}(\bar{\varphi},\varphi)\tag{8.8.44}$$

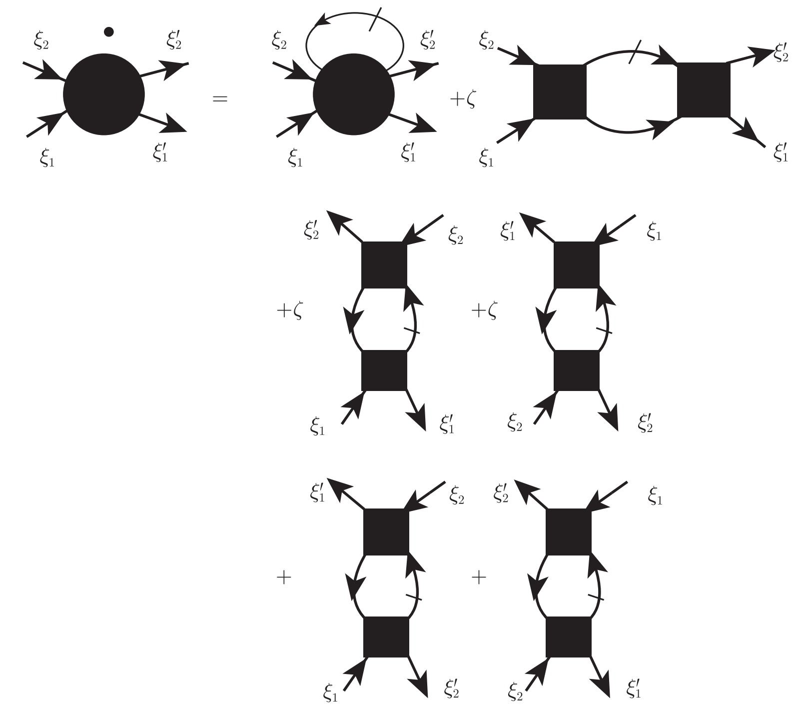


图 8.8.2　式 (8.8.43) 的图形表示

利用式 (8.8.44) 和式 (8.8.38), 就可以确定 n 粒子顶角函数的初始条件 $\gamma_n^{\Lambda_0}$ 了. 我们以有杂质散射作用的体系为例, 此时由于

$$S_{\text{int}}(\bar{\varphi},\varphi)=\sum_{\xi'\xi}V_{\xi'\xi}\bar{\varphi}'_{\xi}\varphi_{\xi} \tag{8.8.45}$$

则知

$$\gamma_0^{\Lambda_0}=0 \tag{8.8.46}$$

$$\gamma_1^{\Lambda_0}(\xi',\xi)=\zeta\Sigma_{\xi',\xi}^{\Lambda_0}=-\mathrm{i}V_{\xi',\xi} \tag{8.8.47}$$

$$\gamma_n^{\Lambda_0}(n\geqslant 2)=0 \tag{8.8.48}$$

而明显写出其 Keldysh 指标也是直接的.

根据不同问题, 可以选取参数 Λ 的不同引进方法. 例如, 在定态输运问题中, 传播子仅依赖于时间差 $t-t'$, 所以可作傅里叶变换到频率空间, 从而频率截断的一个自然选择可以是用阶梯函数 $\theta(|\omega|-\Lambda)$ 表达的尖锐、对称的截断 Λ.

$$G^{0,\Lambda}(\omega)=G^0(\omega)\theta(|\omega|-\Lambda) \tag{8.8.49}$$

虽然有了上述一套完整计算方案, 由它可以去求出自能函数或格林函数, 进而借助于前面几章的知识, 就能给出输运过程的解. 然而流方程一般不能精确求解, 因而往往要借助于数值计算, 由于数值计算与场论本身无关, 所以这里不再详述, 有关例子可以参见文献, 例如, Schmidt H, Wolfle P. Ann. Phys., 2010, 19 (1/2): 60-74; Gezzi R, Pruschke T, Meden V. Phys. Rev., 2007, B75:045324.

附录 8A　线性化 RG 的本征值的不变性

证明在新旧变量之间的非奇异变换下, 新旧线性化 RG 的本征值是相同的.

证明　设旧变量集合为 $\{J_i, i=1,2,\cdots,n\}$, RG 方程为

$$J_i' = \sum_j \left(\frac{\partial J_i'}{\partial J_j}\right)_0 J_i \tag{8A.1}$$

这里为了方便已设不动点 $J_i^* = 0$, 再设线性化 RG 的本征矢量为 φ_i, 即有

$$\sum_j \frac{\partial J_i'}{\partial J_j}\varphi_j = \lambda\varphi_i \tag{8A.2}$$

设新变量集合为 $\{V_i, i=1,2,\cdots,n\}$, 且

$$J_i = J_i(V_1, V_2, \cdots, V_n) \tag{8A.3}$$

所以

$$\frac{\partial J_i'}{\partial J_j} = \sum_{k,l} \frac{\partial J_i'}{\partial V_k'}\frac{\partial V_k'}{\partial V_l}\frac{\partial V_l}{\partial J_j} \tag{8A.4}$$

这样式 (8A.2) 可以写成

$$\sum_j \sum_{k,l} \frac{\partial J_i'}{\partial V_k'}\frac{\partial V_k'}{\partial V_l}\frac{\partial V_l}{\partial J_j}\varphi_j = \lambda\varphi_i \tag{8A.5}$$

如果 $\det\left(\frac{\partial J_i'}{\partial J_j}\right)_0$ 是非奇异的 (有非零的有限值), 那么可以对上式左乘 $\frac{\partial V_m'}{\partial J_i'}$ 并对指标 i 求和, 则可以由式 (8A.5) 得

$$\sum_l \frac{\partial V_n'}{\partial V_l}\chi_l = \lambda\chi_n \tag{8A.6}$$

其中

$$\chi_n = \sum_i \frac{\partial V_n}{\partial J_i}\varphi_i \tag{8A.7}$$

比较式 (8A.6) 与式 (8A.2) 就得知它们有相同的本征值.

第九章　强关联体系、动力学平均场论

第一节　引　　论

量子场论最感兴趣的重要而复杂的问题之一涉及强关联电子体系 (如高温超导体和重费米子化合物等). 这类问题一般不能用传统的方法 (它们大多与微扰论有关) 来处理. 然而, 这一领域至今也没有一种 "普适的" 非微扰论方法能处理各种强关联体系. 现有的一些方法都有各自的局限性. 我们只能根据所研究的对象和目的, 凭借物理直觉和经验, 选择恰当的方法来处理具体问题. 但正是这样一种状况的存在, 又给场论未来的发展提供了巨大的空间.

强关联电子体系的理论模型研究是从 Hubbard 模型 (1.4.55) 开始的, 这是由于它是能获得强关联体系许多重要特征的最简单的模型. 在这个模型中, 能带电子之间具有强的两体在位排斥库仑相互作用 U. 该模型不包含声子, 也不含明显的吸引相互作用, 因而该模型传统上被看成与固体磁性相联系.

尽管实际固体中往往存在许多不同的能带, 但也许每个元胞中仅有少数状态能对体系的基态性质做出大的贡献,从而人们可以去研究单带 (或少数几个带) Hubbard 模型 (1.4.57). 除了 Hubbard 模型外, 由强的在位库仑相互作用支配的典型的模型哈密顿还有 t-J 模型(它被用于建立铜氧化合物的高温超导理论), 以及 Anderson 杂质模型或 Kondo 点阵模型(多带情形).

当库仑排斥作用 U 较弱时, 微扰展开方法是可行的. 但当 U 超过带宽时, 按 U 作微扰展开方法显然是失效的. 那么是否能借助动能作微扰展开呢? 然而这也会遇到如下严重困难: 在动能很小的极限情形 (零迁徙), 点阵模型的基态是无穷简并的, 而且本征态的场算符有非正则对易关系. 这将导致 Wick 定理对于这种场算符不成立, 而基于 Wick 定理的图形微扰方法就不能直接应用到这种情形. 所以必须寻找新的方法.

现在考虑有大的在位排斥作用 U 的单带 Hubbard 模型, 其中每个格位将会处于如下四种状态之一: 空占有态 $|0\rangle$, 单占有态 $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$, 以及双占有态 $|2\rangle \equiv |\uparrow\downarrow\rangle$. 对于少于半满填充情形, 由于双占有在能量上要付出太大的代价, 所以只能通过虚过程来贡献给低能物理. 这样突显出强关联电子的一个典型的特点, 它的动力学被限制到总的态空间中的一个子空间. 而传统方法很难执行到这个子空间上的投影. 为此引入辅助粒子方法来用于态空间中的投影, 并能保持重整化微扰论中大多数所希望的特点. 这种方法的基本思想如下: 对给定格位上的四个态中的每个态 (这里

考虑每个格位一个轨道) 引入一个粒子, 它产生于无粒子的真空态 (它完全无任何格位). (注意：不要把真空态 $|\nu ac\rangle$ 与空占有态 $|0\rangle$ 相混淆, 尽管后者的数学符号已与前者以前用的符号相混.) 电子的费米子性质要求辅助粒子 (赝粒子) 中表示 $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ 的每个粒子应该是费米子, 而表示空占有态和双占有态的粒子应该是玻色子. 为了保证每个格位总是处于上述四个占有态中的某一个, 辅助粒子的数目精确地限制为 1. 在 $U \to \infty$ 从而不出现双占有态的情形, 也可通过空占有态和单占有态粒子数之和为 1 的约束条件来实现.

为此, 可定义两个玻色子算符 $\hat{b}$ 和 $\hat{a}$(通常叫**隶玻色子**算符) 以及两个费米子算符 $\hat{f}_\sigma, (\sigma =\uparrow, \downarrow)$(通常叫**赝费米子**算符), 使得满足

$$\begin{cases} \hat{b}|\nu ac\rangle = 0 \\ \hat{a}|\nu ac\rangle = 0 \\ \hat{f}_\sigma|\nu ac\rangle = 0 \end{cases}, \qquad \begin{cases} \hat{b}^+|\nu ac\rangle = |0\rangle \\ \hat{a}^+|\nu ac\rangle = |2\rangle \\ \hat{f}_\sigma^+|\nu ac\rangle = |\sigma\rangle \end{cases} \tag{9.1.1}$$

和标准的正则对易关系

$$[\hat{b}, \hat{b}^+]_- = 1, \quad [\hat{f}_\sigma, \hat{f}_{\sigma'}^+]_+ = \delta_{\sigma\sigma'} \tag{9.1.2}$$

并且满足**约束**

$$\sum_\sigma \hat{f}_\sigma^+ \hat{f}_\sigma + \hat{b}^+\hat{b} + \hat{a}^+\hat{a} = 1 \tag{9.1.3}$$

在 $U \to \infty$ 时, 因 $\hat{a}$ 和 $\hat{a}^+$ 不会出现, 故必须满足约束

$$\sum_\sigma \hat{f}_\sigma^+ \hat{f}_\sigma + \hat{b}^+\hat{b} = 1 \tag{9.1.4}$$

辅助粒子方法的优点在于它能让我们运用量子场论的机制, 只要能以一种满意的方式处理约束即可. 事实上约束与赝粒子的 Fock 空间中人造的规范对称性密切相关. 借助于在动能上的重整化微扰论, 能建立起这样的形式理论体系, 它容许我们以任何一种所选的守恒近似来保持规范对称性. 另外, 守恒近似可由 Luttinger-Ward 泛函的泛函导数来产生, 只要让 Luttinger-Ward 泛函计及了重要物理过程中的信息并能用一个小参量来展开.

作为一个例子, 下面将把赝粒子途径应用于 Anderson 杂质模型.

需要指出的是, 虽然人们已经把这种赝粒子表示下的平均场论 (常称为隶玻色子平均场论) 应用于该模型的研究, 但一方面我们在前面章节中已讨论过平均场论的基本思想, 另一方面隶玻色子平均场论具有几个严重问题：① 它不可避免地导致费米液体基态, 即使是对多通道模型, 这与这些情形实际的非费米液体行为相背离; ②即使是单通道模型, 平均场近似也给出了一个虚假的从 Kondo 屏蔽态到高温

局域磁矩的一阶相变. 所以我们不再讨论隶玻色子平均场方法, 而主要讨论下面的**图形赝粒子技术**.

另一个适用于强关联体系并有发展潜力的理论途径是**动力学平均场论 (DMFT)** 及其拓广. 动力学平均场方法的基本物理观点是: 在一个给定格位上的动力学被看成在这个格位上的自由度与其他格位上的自由度所产生的外部浴 (bath) 之间发生相互作用.

如果把给定格位上的电子视为 "杂质" 电子, 把外部浴视为由一种有效介质所产生的, 那么原来的点阵模型就转化成嵌入一个有效介质中的单个量子杂质问题, 其中, 这种有效介质需要自洽地确定. 这是通常 DMFT 所采用的所谓**局域杂质自洽近似**(**LISA**).

DMFT 与通常所说的平均场论是不同的. 通常的平均场论会冻结一切自由度 (无论是时间上的还是空间上的). 即使要计及超越平均场近似的量子涨落时, 也是用围绕静态均匀的鞍点作微扰展开来处理量子涨落. 然而局域量子涨落经常有非微扰特性, 此时这种方法就不能正确地加以处理了. DMFT 却不同, 它从一开始就以非微扰的形式来处理涨落. 通常的 DMFT 冻结空间涨落但计及所有局域量子涨落 (即在一给定格位上的可能的量子态之间的时间涨落). 这也是 "动力学" 修饰词的来源. 对于拓广的 DMFT 甚至也能计及空间涨落.

尽管通常的 DMFT 几乎适用于任何强度的相互作用. 但只有在大的空间维数 ($d \to \infty$) 的极限下 (或更恰当地说是在大的格点配位数 ($z \to \infty$) 的极限下), DMFT 才是精确的理论. 对于有限维情形, DMFT 是用 $1/z$(或 $1/d$) 作为小的控制参量的. 值得注意的是, 配位数 z 对于几种三维点阵已是相当大的了, 例如, 对于立方点阵 $z = 6$, 面心立方点阵 $z = 12$. 通常的 DMFT 的另一个缺陷是局域杂质近似无法解释非局域关联很重要的现象, 因此本章我们将简单讨论一下 DMFT 的拓广 —— 集团近似.

我们在本章还分别用Hubbard 模型和 t-J 模型为例来介绍 DMFT 的方法和应用. DMFT 的另一个十分重要的应用是与局域密度近似(LDA) 下的密度泛函理论(DFT) 相结合来作材料的电子结构计算, 这就是本章所要介绍的 LDA+DMFT 途径, 它有着很大的应用潜力.

本章最后初步地简要介绍了另一种研究强关联体系的规范场论方法 (详细的论述将超出本书的目标), 其中以量子霍尔体系和拓扑绝缘体为例来加以说明.

第二节 量子杂质模型的图形赝粒子技术

一、赝粒子表象中的模型哈密顿

我们考虑轨道非简并的 Anderson 单杂质哈密顿:

$$\hat{H}=\hat{H}_{\rm c}+\hat{H}_{\rm d}+\hat{H}_{\rm hyb} \tag{9.2.1}$$

其中, 传导电子的哈密顿为

$$\hat{H}_{\rm c}=\sum_{\underline{k},\sigma}\varepsilon_{\underline{k}}\hat{c}_{\underline{k}}^{+}\hat{c}_{\underline{k}} \tag{9.2.2}$$

杂质的局域 d 电子的哈密顿为

$$\hat{H}_{\rm d}=\varepsilon_{\rm d}\sum_{\sigma}\hat{d}_{\sigma}^{+}\hat{d}_{\sigma}+U\hat{n}_{d\uparrow}\hat{n}_{d\downarrow} \tag{9.2.3}$$

这里为简单起见已设 d 态是非简并的. 因而仅反向自旋的 d 态电子之间有库仑排斥作用 U. U 是形成磁矩的一个原因. 最后, 表示混合项的哈密顿为

$$\hat{H}_{\rm hyb}=\tilde{V}\sum_{\underline{k}\sigma}\left(\hat{c}_{\underline{k}\sigma}^{+}\hat{d}_{\sigma}+{\rm h.c.}\right) \tag{9.2.4}$$

其中, $\tilde{V}$ 代表杂化强度. 在赝粒子表象 (9.1.1) 中, 可以将有库仑排斥作用 U 的 d 电子算符用赝粒子算符来表示, 因为有

$$\hat{d}_{\sigma}^{+}|0\rangle=|\sigma\rangle,\quad |2\rangle\equiv|\uparrow\downarrow\rangle=\hat{d}_{\uparrow}^{+}|\downarrow\rangle=-\hat{d}_{\downarrow}^{+}|\uparrow\rangle \tag{9.2.5}$$

故利用式 (9.1.1) 不难验证有

$$\hat{d}_{\sigma}^{+}=\hat{f}_{\sigma}^{+}\hat{b}+\varsigma_{\sigma}\hat{a}^{+}\hat{f}_{\bar{\sigma}} \tag{9.2.6}$$

其中, $\sigma=\uparrow,\downarrow$, $\bar{\sigma}=\downarrow,\uparrow$, 而因子 $\varsigma_{\sigma}=\pm1$, 计及了双占有态的反对称性. 这样, 单通道(非简并)Anderson 哈密顿在赝粒子表象中将取如下形式：

$$\hat{H}=\hat{H}_{\rm c}+\varepsilon_{\rm d}\left(\sum_{\sigma}\hat{f}_{\sigma}^{+}\hat{f}_{\sigma}+2\hat{a}^{+}\hat{a}\right)+U\hat{a}^{+}\hat{a}+\tilde{V}\sum_{\underline{k}\sigma}\left[\hat{c}_{\underline{k}\sigma}^{+}\left(\hat{b}^{+}\hat{f}_{\sigma}+\varsigma_{\sigma}\hat{f}_{\bar{\sigma}}\hat{a}\right)+{\rm h.c.}\right] \tag{9.2.7}$$

在 $U\to\infty$ 时, 哈密顿的形式则应为

$$\hat{H}=\hat{H}_{\rm c}+\varepsilon_{\rm d}\sum_{\sigma}\hat{f}_{\sigma}^{+}\hat{f}_{\sigma}+\tilde{V}\sum_{\underline{k}\sigma}\left(\hat{c}_{\underline{k}\sigma}^{+}\hat{b}^{+}\hat{f}_{\sigma}+{\rm h.c.}\right) \tag{9.2.8}$$

为简单起见, 下面我们以式 (9.2.8) 为例来讨论. 由式 (9.1.4) 知, 算符约束

$$Q\equiv\sum_{\sigma}\hat{f}_{\sigma}^{+}\hat{f}_{\sigma}+\hat{b}^{+}\hat{b}=1 \tag{9.2.9}$$

必须始终满足. 我们可以把这个约束看成一种关于电荷量子化的表述, 其中, 量子化电荷 Q 是守恒量, 等于整数 1. 而守恒荷的存在必然与某种局域规范对称性相联系. 事实上, 式 (9.2.8) 在局域 $U(1)$ 规范变换 $\hat{f}_{\sigma}\to\hat{f}_{\sigma}{\rm e}^{{\rm i}\phi(\tau)}$, $\hat{b}\to\hat{b}{\rm e}^{{\rm i}\phi(\tau)}$(其中, $\phi(\tau)$ 是任意的依赖时间的相) 下保持不变. 尽管规范对称性保证了量子化荷 Q 的守恒, 但却不能挑出特殊的 Q 值, 特别是我们所需要的 $Q=1$ 的值.

为此我们来讨论投影到 $Q=1$ 的物理态空间的方法.

二、向物理态空间上投影

考虑一个关于 Q 的巨正则系综, 其巨配分函数为

$$Z_{\mathrm{G}}(\lambda)=\mathrm{tre}^{-\beta(\hat{H}+\lambda Q)} \tag{9.2.10}$$

其中, $-\lambda$ 相当于化学势. 求迹是对完全的 Fock 空间 $F=F_0\oplus F_1\oplus\cdots\oplus F_Q\oplus\cdots$ 而言的, 包括对 Q 的求和. 对这样的巨正则系综, 相应的密度算符为

$$\hat{\rho}_{\mathrm{G}}=\frac{1}{Z_{\mathrm{G}}(\lambda)}\mathrm{e}^{-\beta(\hat{H}+\lambda Q)} \tag{9.2.11}$$

因为 Q 是守恒量, 所以巨配分函数 $Z_{\mathrm{G}}(\lambda)$ 能表达成每个子空间 F_Q 中的正则配分函数 $Z_{\mathrm{C}}(Q)$ 的和：

$$Z_{\mathrm{G}}(\lambda)=\sum_{Q=0}^{\infty}Z_{\mathrm{C}}(Q)\mathrm{e}^{-\beta\lambda Q} \tag{9.2.12}$$

而物理巨配分函数是 F_1 子空间中的 $Z_{\mathrm{C}}(1)$, 它可以通过将 $Z_{\mathrm{G}}(\lambda)$ 对逸度$\zeta\equiv\mathrm{e}^{-\beta\lambda}$ 求导来得到. 事实上, 由式 (9.2.12) 直接可得

$$\lim_{\lambda\to\infty}\frac{\partial Z_{\mathrm{G}}(\lambda)}{\partial\zeta}=\lim_{\lambda\to\infty}\sum_{Q=0}^{\infty}Z_{\mathrm{C}}(Q)Q\mathrm{e}^{-\beta\lambda(Q-1)}=Z_{\mathrm{C}}(1) \tag{9.2.13}$$

令 $Z_{\mathrm{G}}(\lambda)=\exp[-\beta\Omega(\lambda)]$, 其中, $\Omega(\lambda)$ 是巨正则势. 则有

$$\frac{\partial\Omega(\lambda)}{\partial\lambda}=\frac{1}{Z_{\mathrm{G}}(\lambda)}\mathrm{tr}\left(\mathrm{e}^{-\beta(\hat{H}-\lambda\hat{Q})}\hat{Q}\right)=\langle\hat{Q}\rangle_{\lambda} \tag{9.2.14}$$

其中, 我们已将 $\hat{Q}$ 在巨正则系综中的平均值用下标 λ 来表示.

$$\begin{aligned}Z_{\mathrm{C}}(1)&=\lim_{\lambda\to\infty}\frac{\partial}{\partial\varsigma}\mathrm{e}^{-\beta\Omega(\lambda)}=\lim_{\lambda\to\infty}\mathrm{e}^{-\beta\Omega(\lambda)}(-\beta)\frac{\partial\lambda}{\partial\varsigma}\frac{\partial\Omega(\lambda)}{\partial\lambda}\\&=\lim_{\lambda\to\infty}\left[\mathrm{e}^{-\beta\Omega(\lambda)}\varsigma^{-1}\langle\hat{Q}\rangle_{\lambda}\right]=\lim_{\lambda\to\infty}Z_{\mathrm{G}}(\lambda)\lim_{\lambda\to\infty}\left[\varsigma^{-1}\langle\hat{Q}\rangle_{\lambda}\right]\end{aligned}$$

由于

$$\lim_{\lambda\to\infty}Z_{\mathrm{G}}(\lambda)=\lim_{\lambda\to\infty}\sum_{Q=0}^{\infty}Z_{\mathrm{C}}(Q)\mathrm{e}^{-\beta\lambda Q}=Z_{\mathrm{C}}(0)$$

所以

$$Z_{\mathrm{C}}(1)=\left(\lim_{\lambda\to\infty}\mathrm{e}^{\beta\lambda}\langle\hat{Q}\rangle_{\lambda}\right)Z_{\mathrm{C}}(0) \tag{9.2.15}$$

其中, $Z_{\mathrm{C}}(0)$ 是 $Q=0$ 子空间 (无杂质态空间) 的配分函数, 即自由电子能带的配分函数. 现在考虑

$$\begin{aligned}\langle\hat{A}\hat{Q}\rangle_\lambda&=\frac{1}{Z_{\mathrm{G}}(\lambda)}\mathrm{tr}\left(\mathrm{e}^{-\beta(\hat{H}+\lambda\hat{Q})}\hat{A}\hat{Q}\right)\\&=\frac{1}{Z_{\mathrm{G}}(\lambda)}\sum_{Q=0}^{\infty}\left[\left(\mathrm{tr}(\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}}\hat{A})\right)_{F_Q}Q\mathrm{e}^{-\beta\lambda Q}\right]\end{aligned}\tag{9.2.16}$$

故有

$$\lim_{\lambda\to\infty}\langle\hat{A}\hat{Q}\rangle_\lambda=\frac{1}{Z_{\mathrm{C}}(0)}\lim_{\lambda\to\infty}\left(\mathrm{tr}(\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}}\hat{A})\right)_{F_1}\mathrm{e}^{-\beta\lambda}\tag{9.2.17}$$

所以

$$\lim_{\lambda\to\infty}\frac{\langle\hat{A}\hat{Q}\rangle_\lambda}{\langle\hat{Q}\rangle_\lambda}=\lim_{\lambda\to\infty}\frac{\mathrm{tr}\left(\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}}\hat{A}\right)_{F_1}}{\langle\hat{Q}\rangle_\lambda\mathrm{e}^{\beta\lambda}Z_{\mathrm{C}}(0)}=\frac{1}{Z_{\mathrm{C}}(1)}\mathrm{tr}\left(\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}}\hat{A}\right)_{F_1}$$

即

$$\langle\hat{A}\rangle_{F_1}=\lim_{\lambda\to\infty}\frac{\langle\hat{A}\hat{Q}\rangle_\lambda}{\langle Q\rangle_\lambda}\tag{9.2.18}$$

式 (9.2.15) 的另一个重要特例是, 若任何一个算符 $\hat{A}$ 在 $Q=0$ 的子空间 F_0 上有零期待值 $(\hat{A}|Q=0\rangle=0)$, 则它在 $Q=1$ 物理子空间 F_1 上的正则期待值为

$$\langle\hat{A}\rangle_{F_1}=\lim_{\lambda\to\infty}\frac{\langle\hat{A}\rangle_\lambda}{\langle\hat{Q}\rangle_\lambda}\tag{9.2.19}$$

这是因为有

$$\begin{aligned}\langle\hat{A}\rangle_\lambda&=\frac{1}{Z_{\mathrm{G}}(\lambda)}\sum_{Q=0}^{\infty}\left[\left(\mathrm{tr}(\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}}A)\right)_{F_Q}\mathrm{e}^{-\beta\lambda Q}\right]\\&=\frac{1}{Z_{\mathrm{G}}(\lambda)}\left[\left(\mathrm{tr}(\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}}\hat{A})\right)_{F_1}\mathrm{e}^{-\beta\lambda}+\left(\mathrm{tr}(\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}}\hat{A})\right)_{F_2}\mathrm{e}^{-2\beta\lambda}+\cdots\right]\end{aligned}$$

从而有

$$\lim_{\lambda\to\infty}\langle\hat{A}\rangle_\lambda=\lim_{\lambda\to\infty}\frac{1}{Z_{\mathrm{C}}(0)}\left(\mathrm{tr}(\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}}\hat{A})\right)_{F_1}\mathrm{e}^{-\beta\lambda}=\lim_{\lambda\to\infty}\langle\hat{A}\hat{Q}\rangle_\lambda$$

注意关系式 (9.2.19) 的条件 $\hat{A}|Q=0\rangle=0$ 对任何作用在杂质上的物理可观察量是成立的. 例如, 由于$|Q=0\rangle$ 态意味着无赝粒子, 所以诸如物理电子算符 $\hat{d}_\sigma=\hat{f}_\sigma^+\hat{b}$ 或局域自旋算符 $\underline{\hat{S}}=\dfrac{1}{2}\sum\limits_{\sigma\sigma'}\hat{f}_\sigma^+\underline{\sigma}_{\sigma\sigma'}\hat{f}_{\sigma'}$ 都满足上述条件. 特别地, 若取 $\hat{A}$ 为 d 电子算符的编时乘积, 我们借助于巨正则系综的 d 电子格林函数 $g_{\mathrm{d}}(\omega,\lambda)$ 从式 (9.2.19) 得到受限 d 电子格林函数 $g_{\mathrm{d}}(\omega)$:

$$g_{\mathrm{d}}(\omega)=\lim_{\lambda\to\infty}\frac{g_{\mathrm{d}}(\omega,\lambda)}{\langle\hat{Q}\rangle_\lambda}\tag{9.2.20}$$

作为投影 $\lambda\to\infty$ 的一个结果, $\hat{H}+\lambda\hat{Q}$ 的能量本征值和 $\lambda\hat{Q}$ 一样, 标度趋于无穷. 因此通过 λ 来**移动“赝粒子”的频率标度的零点**是有用的, 即要先作代换 $\omega\to\omega+\lambda$, 然后再取极限 $\lambda\to\infty$. 这种移动代换并不会影响物理量 (如局域 d 电子的格林函数) 的能量标度, 因为可由式 (9.2.6) 看出这种能标总是赝费米子和隶玻色子能量之差.

借助于 Wick 定理, $g_{\rm d}(\omega,\lambda)$ 又可借助于扩大了的态空间 $(Q=0,1,2,\cdots)$ 中的巨正则赝费米子和隶玻色子格林函数来表示. 在松原表象中, 这些巨正则赝粒子格林函数定义为

$$g_{{\rm f}\sigma}(\tau-\tau',\lambda)=-\langle T_\tau\hat{f}_\sigma(\tau)\hat{f}^+_{\sigma'}(\tau')\rangle_\lambda \tag{9.2.21}$$

$$g_{\rm b}(\tau-\tau',\lambda)=-\langle T_\tau\hat{b}(\tau)\hat{b}^+(\tau')\rangle_\lambda \tag{9.2.22}$$

它们的傅里叶变换为

$$g_{\rm f,b}({\rm i}\omega_n,\lambda)=\int_0^\beta {\rm d}\tau{\rm e}^{{\rm i}\omega_n\tau}g_{\rm f,b}(\tau,\lambda) \tag{9.2.23}$$

但 ω_n 的取值对 f 粒子和 b 粒子是不同的 (参见式 (3.2.6) 及式 (3.2.5)). 借助于自能函数, 巨正则系综中的赝粒子格林函数可表达为

$$g_{\rm f}({\rm i}\omega_n,\lambda)=\frac{1}{{\rm i}\omega_n-\lambda-\varepsilon_{\rm d}-\Sigma_{\rm f}({\rm i}\omega_n,\lambda)} \tag{9.2.24}$$

$$g_{\rm b}({\rm i}\omega_n,\lambda)=\frac{1}{{\rm i}\omega_n-\lambda-\Sigma_{\rm b}({\rm i}\omega_n,\lambda)} \tag{9.2.25}$$

故我们定义投影后的格林函数为

$$g_{\rm f,b}(\omega)=\lim_{\lambda\to\infty}g_{\rm f,b}(\omega+\lambda,\lambda) \tag{9.2.26}$$

而且传导电子的格林函数为

$$g_{{\rm c}\sigma}({\rm i}\omega_n,\lambda)=\frac{1}{(g^0_{{\rm c}\sigma})^{-1}-\Sigma_{{\rm c}\sigma}({\rm i}\omega_n,\lambda)} \tag{9.2.27}$$

其中, $g^0_{{\rm c}\sigma}(\omega)=\displaystyle\int{\rm d}\varepsilon\frac{A_{{\rm c}\sigma}(\varepsilon)}{\omega-\varepsilon}$ 是传导带的裸局域格林函数; $A_{{\rm c}\sigma}(\varepsilon)$ 是传导电子谱密度; $\Sigma_{{\rm c}\sigma}({\rm i}\omega_n,\lambda)$ 是巨正则传导电子自能.

在 d 电子格林函数和 $\Sigma_{\rm c}$ 之间存在一个精确关系 (参见附录 9A)

$$g_{{\rm d}\sigma}({\rm i}\omega_n,\lambda)=\frac{\Sigma_{{\rm c}\sigma}({\rm i}\omega_n,\lambda)}{\tilde{V}^2\left[1-\Sigma_{{\rm c}\sigma}({\rm i}\omega_n,\lambda)g^0_{{\rm c}\sigma}({\rm i}\omega_n)\right]} \tag{9.2.28}$$

现在考虑赝粒子数的巨正则期待值 $\langle\hat{Q}\rangle_\lambda$. 它可借助于 (未投影的) 赝粒子谱函数来给出. 参见式 (5.3.45), 可知

$$\begin{aligned}\langle\hat{Q}\rangle_\lambda &= \sum_\sigma \langle\hat{f}_\sigma^+\hat{f}_\sigma\rangle_\lambda + \langle\hat{b}^+\hat{b}\rangle_\lambda \\ &= \int \mathrm{d}\omega \left[n_\mathrm{F}(\omega)\sum_\sigma A_{\mathrm{f}\sigma}(\omega,\lambda) + n_\mathrm{B}(\omega)A_\mathrm{b}(\omega,\lambda)\right]\end{aligned} \tag{9.2.29}$$

其中, $A_{\mathrm{f,b}}(\omega,\lambda) = -\dfrac{1}{\pi}\mathrm{Im}g_{\mathrm{f,b}}(\omega+\mathrm{i}0^+,\lambda)$. 将此式代入式 (9.2.15), 作代换 $\omega\to\omega+\lambda$, 然后再取极限 $\lambda\to\infty$ 可得

$$\frac{Z_\mathrm{C}(1)}{Z_\mathrm{C}(0)} = \lim_{\lambda\to\infty}\mathrm{e}^{\beta\lambda}\langle\hat{Q}\rangle_\lambda = \int \mathrm{d}\omega\mathrm{e}^{\beta\omega}\left[\sum_\sigma A_{\mathrm{f}\sigma}(\omega) + A_\mathrm{b}(\omega)\right] \tag{9.2.30}$$

其中, $A_{\mathrm{f,b}}(\omega) = \lim\limits_{\lambda\to\infty} A_{\mathrm{f,b}}(\omega+\lambda,\lambda)$. 式 (9.2.30) 在数值计算中是存在困难的, 例如, 当 $\omega<0$ 时, 玻尔兹曼因子 $\mathrm{e}^{\beta\omega}$ 将发散. 此外, $T=0$ 时, $A_{\mathrm{f,b}}(\omega)$ 在某个阈值频率处发散, 而这个阈值频率的准确位置又事先无法知道. 所以我们可以实施如下变换:

在实施投影 $\omega\to\omega+\lambda$ 和 $\omega\to\infty$ 之前, 重新定义赝粒子函数 $A_{\mathrm{f,b}}$ 的频率标度, 即令 $\omega\to\omega+\lambda_0$, 其中, λ_0 是有限的参数, 使得在每次迭代中, 所选 λ_0 满足关系式

$$\int \mathrm{d}\omega\mathrm{e}^{\beta\omega}\left[\sum_\sigma A_{\mathrm{f}\sigma}(\omega) + A_\mathrm{b}(\omega)\right] = 1 \tag{9.2.31}$$

其中

$$A_{\mathrm{f,b}}(\omega) = \lim_{\lambda\to\infty} A_{\mathrm{f,b}}(\omega+\lambda_0,\lambda) \tag{9.2.32}$$

是新的参考能量下的赝粒子的谱密度函数. 这种程序定义的赝粒子频率标度使得谱函数的 $T=0$ 时的阈值发散是在一个固定频率 $\omega=0$ 处. 这种方法可显著提高数值计算的精度和速度.

由式 (9.2.20)、式 (9.2.30) 和式 (9.2.31) 知

$$g_\mathrm{d}(\omega) = \lim_{\lambda\to\infty}\mathrm{e}^{\beta\lambda}g_\mathrm{d}(\omega,\lambda) \tag{9.2.33}$$

由上面的讨论可以看出, 问题显然归结到我们能选择适当的近似来计算出三种自能上了. 但我们的近似必须满足一定的规范不变性要求. 虽然格林函数 $g_\mathrm{f}, g_\mathrm{b}$ 在时间上的局域规范变换下不是不变的, 但必须要求 g_d 是不变的. 由于 d 电子数 n_d 不是守恒量, 故构建一个规范不变近似不是平庸的, 下面我们就来讨论守恒近似方法.

三、杂化强度上的规范不变自洽微扰论

只要违反规范对称的东西 (如玻色场期待值或费米子对的关联函数) 不出现在理论中, 物理量的规范不变性就能在适当选择的近似中得到保证. 这要求应该使用从 Luttinger–Ward 泛函导出的**守恒近似**.

由第三章第四节可知, 自能能够通过 Luttinger–Ward 泛函 $\varPhi$ 对相应的格林函数的泛函导数来得到:

$$\varSigma_{\mathrm{f,b,c}} = \frac{\delta\varPhi}{\delta g_{\mathrm{f,b,c}}} \tag{9.2.34}$$

对 $\varPhi$ 的图形选择的不同, 就给出了不同的近似, 这种近似应该由主要物理过程所决定, 同时也由小参量 (如果存在) 展开所决定. 对于感兴趣的物理情形, 我们前面所讨论的 Anderson 模型中的杂化强度是远小于导带带宽的, 即满足 $N(0)\tilde{V} \ll 1$, 其中, $N(0)$ 是在费米能级处的局域传导电子的态密度. 因而可实施在 $N(0)\tilde{V}$ 上的微扰展开. 但是即使有小参量, 如果出现奇异顶角函数, 直接的低阶重整化微扰论也许不会给出一个定性正确的一致结果. 因此必须检查顶角函数是否奇异. 若是这样, 顶角函数必须以规范不变的方式包括到近似中. 下面我们来讨论最简单的一种所谓的**非交叉近似 (NCA)**.

因和杂化强度有关的无量纲参数 $N(0)V$ 是小量, 故可考虑 $\varPhi$ 在 V 上的最低阶 (二阶) 图作为近似. 由于 $\varPhi$ 是由完全格林函数构成的骨架真空图, 故其图形如图 9.2.1 所示.

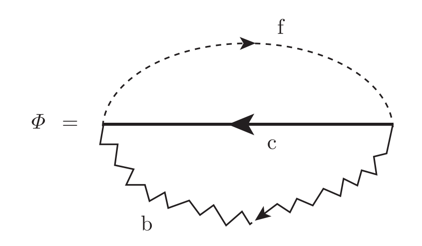


图 9.2.1 最低阶 $\varPhi$ 图

图 9.2.1 中, 实线代表传导电子格林函数, 虚线代表赝费米子完全格林函数, 折线代表隶玻色子完全格林函数. 由这个图可得到自能图, 这只要注意到 $\varPhi$ 对某个格林函数的泛函导数相当于将这个格林函数线从 $\varPhi$ 图中截断, 故分别得到 $\varSigma_{\mathrm{f,b,c}}$ 所对应的三个图形, 如图 9.2.2 所示. 利用这些图可以得到这些量所满足的方程:

$$\varSigma_{\mathrm{b}}(\mathrm{i}\varOmega) = \tilde{V}^2\frac{1}{\beta}\sum_{\sigma,\omega'} g_{\mathrm{c}\sigma}(\mathrm{i}\omega')g_{\mathrm{f}\sigma}(\mathrm{i}\varOmega + \mathrm{i}\omega') \tag{9.2.35}$$

$$\varSigma_{\mathrm{f}\sigma}(\mathrm{i}\omega) = -\tilde{V}^2\frac{1}{\beta}\sum_{\omega'} g_{\mathrm{c}\sigma}(\mathrm{i}\omega')g_{\mathrm{b}}(\mathrm{i}\omega - \mathrm{i}\omega') \tag{9.2.36}$$

$$\Sigma_{\mathrm{c}\sigma}(\mathrm{i}\omega) = -\tilde{V}^2 \frac{1}{\beta} \sum_{\Omega} g_{\mathrm{f}\sigma}(\mathrm{i}\omega + \mathrm{i}\Omega) g_{\mathrm{b}}(\mathrm{i}\Omega) \tag{9.2.37}$$

其中, ω, ω' 是费米型的松原频率; Ω 是玻色型的松原频率. 式 (9.2.35)~ 式 (9.2.37) 右边的正负号的差别来自 Σ_{b} 的图中有一个费米子圈. 进一步可以利用对松原频率的泊松求和公式, 并执行到实轴的解析延拓和到物理空间上的投影, 将分别得到

$$\Sigma_{\mathrm{b}}(\Omega + \mathrm{i}0^+) = \tilde{V}^2 \sum_{\sigma} \int \mathrm{d}\xi n_{\mathrm{F}}(\xi) A_{\mathrm{c}\sigma}(\xi) g_{\mathrm{f}\sigma}(\Omega + \xi + \mathrm{i}0^+) \tag{9.2.38}$$

其中, $A_{\mathrm{c}\sigma}$ 是传导电子的谱密度.

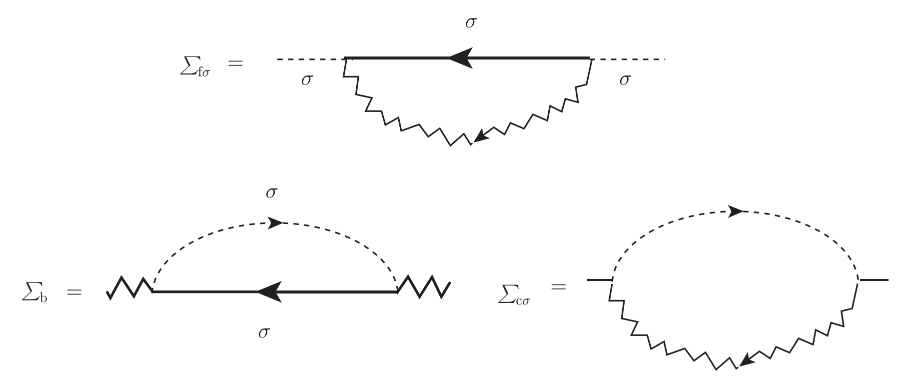


图 9.2.2　三种自能图

证明　利用传导电子和赝费米子的谱密度关系式:

$$g_{\mathrm{c}\sigma}(\mathrm{i}\omega_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\xi \frac{A_{\mathrm{c}\sigma}(\xi)}{\mathrm{i}\omega_n - \xi}$$

$$g_{\mathrm{f}\sigma}(\mathrm{i}\omega_n; \lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\eta \frac{A_{\mathrm{f}\sigma}(\eta; \lambda)}{\mathrm{i}\omega_n - \lambda - \eta}$$

可由式 (9.2.35) 得

$$\begin{aligned}
\Sigma_{\mathrm{b}}(\mathrm{i}\Omega_n; \lambda) &= \frac{V^2}{\beta} \sum_{\omega_n, \sigma} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\xi \frac{A_{\mathrm{c}\sigma}(\xi)}{\mathrm{i}\omega_n - \xi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\eta \frac{A_{\mathrm{f}\sigma}(\eta; \lambda)}{\mathrm{i}\Omega_n + \mathrm{i}\omega_n - \lambda - \eta} \\
&= \frac{V^2}{\beta} \sum_{\sigma} \left(-\frac{\beta}{2\pi\mathrm{i}}\right) \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\xi \mathrm{d}\eta \oint_C \mathrm{d}z n_{\mathrm{F}}(z) \frac{A_{\mathrm{c}\sigma}(\xi) A_{\mathrm{f}\sigma}(\eta; \lambda)}{(z - \xi)(\mathrm{i}\Omega_n + z - \lambda - \eta)} \\
&= V^2 \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\xi \mathrm{d}\eta A_{\mathrm{c}\sigma}(\xi) A_{\mathrm{f}\sigma}(\eta; \lambda) \frac{n_{\mathrm{F}}(\xi) - n_{\mathrm{F}}(\lambda + \eta)}{\mathrm{i}\Omega_n + \xi - \lambda - \eta}
\end{aligned}$$

其中, 利用了 $\exp(\mathrm{i}\beta\Omega_n) = 1$, 从而有 $n_{\mathrm{F}}(\lambda + \eta - \mathrm{i}\Omega_n) = n_{\mathrm{F}}(\lambda + \eta)$ 的事实. 注意到当 $\lambda \to \infty$ 时, $n_{\mathrm{F}}(\lambda + \eta)$ 的积分为零, 这是因为可证明此时 $A_{\mathrm{f}\sigma}$ 在 $\eta = -\lambda$ 无权重,

而在其他情形 $n_{\mathrm{F}}(\lambda+\eta)$ 又呈指数地趋于零. 这样有

$$\begin{aligned}\varSigma_{\mathrm{b}}(\varOmega+\mathrm{i}0^{+})&=\lim_{\lambda\to\infty}\varSigma_{\mathrm{b}}(\varOmega+\lambda;\lambda)\\&=\lim_{\lambda\to\infty}V^{2}\sum_{\sigma}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta n_{\mathrm{F}}(\xi)A_{\mathrm{c}\sigma}(\xi)\frac{A_{\mathrm{f}\sigma}(\eta;\lambda)}{\varOmega+\mathrm{i}0^{+}+\xi-\eta}\end{aligned}$$

此即式 (9.2.38).

类似地可证明有

$$\varSigma_{\mathrm{f}\sigma}(\omega+\mathrm{i}0^{+})=\tilde{V}^{2}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\xi\left[1-n_{\mathrm{F}}(\xi)\right]A_{\mathrm{c}\sigma}(\xi)g_{\mathrm{b}}(\omega-\xi+\mathrm{i}0^{+})\tag{9.2.39}$$

以及

$$\begin{aligned}\varSigma_{\mathrm{c}\sigma}(\omega+\mathrm{i}0^{+},\lambda\to\infty)=&\tilde{V}^{2}\mathrm{e}^{-\beta\lambda}\int_{\infty}^{-\infty}\mathrm{d}\xi\mathrm{e}^{-\beta\xi}\cdot[g_{\mathrm{f}\sigma}(\xi+\omega+\mathrm{i}0^{+})A_{\mathrm{b}}(\xi)\\&-A_{\mathrm{f}\sigma}(\xi)g_{\mathrm{b}}(\xi-\omega-\mathrm{i}0^{+})]\end{aligned}\tag{9.2.40}$$

其中, 式 (9.2.40) 的证明中要利用 $\exp(-\mathrm{i}\beta\omega_n)=-1$. 在式 (9.2.38)~ 式 (9.2.40) 中, 有

$$g_{\mathrm{f}\sigma}(\omega+\mathrm{i}0^{+})=\frac{1}{\omega-\varepsilon_{\mathrm{d}}-\lambda_0-\varSigma_{\mathrm{f}\sigma}(\omega+\mathrm{i}0^{+})}\tag{9.2.41}$$

$$g_{\mathrm{b}}(\omega+\mathrm{i}0^{+})=\frac{1}{\omega-\lambda_0-\varSigma_{\mathrm{b}}(\omega+\mathrm{i}0^{+})}\tag{9.2.42}$$

其中, $A_{\mathrm{f}\sigma}(\omega)=-\mathrm{Im}g_{\mathrm{f}\sigma}(\omega+\mathrm{i}0^{+})/\pi$ 等, 并且有限能量的移动 λ_0 的选择应使得式 (9.2.31) 成立.

由式 (9.2.40) 可以看出, 当 $\lambda\to\infty$ 时, $\varSigma_{\mathrm{c}\sigma}(\omega)\sim\mathrm{e}^{-\beta\lambda}$. 故可得到如下两个结论:

(1) 它对 $g_{\mathrm{c}\sigma}$ 的自能贡献可忽略, $g_{\mathrm{c}\sigma}=g_{\mathrm{c}\sigma}^{0}$.

(2) $g_{\mathrm{d}\sigma}$ 的分母中可略去含 $\varSigma_{\mathrm{c}\sigma}$ 的项 (参见式 (9.2.28)), 故

$$g_{\mathrm{d}\sigma}(\omega;\lambda)=\frac{1}{\tilde{V}^{2}}\varSigma_{\mathrm{c}\sigma}(\omega;\lambda)\tag{9.2.43}$$

所以由式 (9.2.33) 知, 物理 d 电子的格林函数应满足

$$g_{\mathrm{d}\sigma}(\omega)=\frac{1}{\tilde{V}^{2}}\lim_{\lambda\to\infty}\mathrm{e}^{\beta\lambda}\varSigma_{\mathrm{c}\sigma}(\omega;\lambda)\tag{9.2.44}$$

将式 (9.2.40) 代入可得

$$g_{\mathrm{d}\sigma}(\omega+\mathrm{i}0^{+})=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\xi\mathrm{e}^{-\beta\xi}\left[g_{\mathrm{f}\sigma}(\xi+\omega+\mathrm{i}0^{+})A_{\mathrm{b}}(\xi)-A_{\mathrm{f}\sigma}(\xi)g_{\mathrm{b}}(\xi-\omega-\mathrm{i}0^{+})\right]\tag{9.2.45}$$

利用 $\dfrac{1}{x\pm \mathrm{i}0^+}=P\dfrac{1}{x}\mp \mathrm{i}\pi\delta(x)$, 可以得到 $G_{\mathrm{d}\sigma}$ 的虚部为

$$\mathrm{Im}G_{\mathrm{d}\sigma}(\omega+\mathrm{i}0^+)=-\frac{\pi}{f(-\omega)}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\xi \mathrm{e}^{-\beta\xi}A_{\mathrm{f}\sigma}(\xi+\omega)A_{\mathrm{b}}(\xi) \tag{9.2.46}$$

至此, 我们已经建立了一组在非交叉近似下的完全的计算单杂质非简并 Anderson 模型的格林函数等的方程组, 而它们需要自洽地求解.

不过上述方程的形式对数值求解不太方便, 例如, 式 (9.2.46) 中的玻尔兹曼因子 $\mathrm{e}^{-\beta\xi}$ 在 $\omega\to\infty$ 时发散, 这意味着 $A_{\mathrm{f,b}}(\xi)$ 的自洽解对于负频率 ξ 应指数地趋于零 ($\sim \mathrm{e}^{\beta\xi}$). 所以更方便的是借助于如下定义的新函数:

$$\tilde{A}_{\mathrm{f,b}}(\omega)=A_{\mathrm{f,b}}(\omega)/n_{\mathrm{F}}(-\omega) \tag{9.2.47}$$

$$\mathrm{Im}\tilde{\Sigma}_{\mathrm{f,b}}(\omega)=\mathrm{Im}\Sigma_{\mathrm{f,b}}(\omega)/n_{\mathrm{F}}(-\omega) \tag{9.2.48}$$

来重新表述自洽方程组, 它们分别为

$$\mathrm{Im}\tilde{\Sigma}_{\mathrm{f}\sigma}(\omega+\mathrm{i}0^+)=-\pi\tilde{V}^2\int \mathrm{d}\xi\frac{n_{\mathrm{F}}(-\xi)[1-n_{\mathrm{F}}(\omega-\xi)]}{1-n_{\mathrm{F}}(\omega)}A_{\mathrm{c}\sigma}(\xi)\tilde{A}_{\mathrm{b}}(\omega-\xi) \tag{9.2.49}$$

$$\mathrm{Im}\tilde{\Sigma}_{\mathrm{b}}(\omega+\mathrm{i}0^+)=-\pi\tilde{V}^2\sum_{\sigma}\int \mathrm{d}\xi\frac{n_{\mathrm{F}}(\xi)[1-n_{\mathrm{F}}(\omega+\xi)]}{1-n_{\mathrm{F}}(\omega)}A_{\mathrm{c}\sigma}(\xi)\tilde{A}_{\mathrm{f}\sigma}(\omega+\xi) \tag{9.2.50}$$

$$\mathrm{Im}G_{\mathrm{d}\sigma}(\omega+\mathrm{i}0^+)=-\pi\int \mathrm{d}\xi\,[n_{\mathrm{F}}(\xi+\omega)n_{\mathrm{F}}(-\xi)+n_{\mathrm{F}}(-\xi-\omega)n_{\mathrm{F}}(\xi)]\tilde{A}_{\mathrm{f}\sigma}(\xi+\omega)\tilde{A}_{\mathrm{b}}(\xi) \tag{9.2.51}$$

$$\int \mathrm{d}\omega n_{\mathrm{F}}(\omega)\left[\sum_{\sigma}\tilde{A}_{\mathrm{f}\sigma}(\omega)+\tilde{A}_{\mathrm{b}}(\omega)\right]=1 \tag{9.2.52}$$

其中

$$\tilde{A}_{\mathrm{f}\sigma}(\omega)=-\frac{1}{\pi}\frac{\mathrm{Im}\tilde{\Sigma}_{\mathrm{f}\sigma}(\omega+\mathrm{i}0^+)}{[\omega+\mathrm{i}0^+-\varepsilon_{\mathrm{d}}-\lambda_0-\mathrm{Re}\Sigma_{\mathrm{f}\sigma}(\omega+\mathrm{i}0^+)]^2+[\mathrm{Im}\Sigma_{\mathrm{f}\sigma}(\omega+\mathrm{i}0^+)]^2} \tag{9.2.53}$$

$$\tilde{A}_{\mathrm{b}}(\omega)=-\frac{1}{\pi}\frac{\mathrm{Im}\tilde{\Sigma}_{\mathrm{b}}(\omega+\mathrm{i}0^+)}{[\omega+\mathrm{i}0^+-\lambda_0-\mathrm{Re}\Sigma_{\mathrm{b}}(\omega+\mathrm{i}0^+)]^2+[\mathrm{Im}\Sigma_{\mathrm{b}}(\omega+\mathrm{i}0^+)]^2} \tag{9.2.54}$$

而对于自能 $\Sigma_{\mathrm{f,b}}$ 的实部, 我们可以利用 Kramers-Kroenig 关系式从自能 $\Sigma_{\mathrm{f,b}}$ 的虚部推导出来, 这样这组新的自洽方程就完善了. 上述方法容许我们能有效地求解 NCA 方程直到 $10^{-4}T_K$ 的温度.

NCA 不仅简单并能正确地揭示体系的某些性质. 但 NCA 有着较大的局限性, 例如, 它无法揭示出单通道情形下局域费米液体行为, 也不能正确地给出比热和剩余熵等. 这是由于它仅计及了最低阶图, 其中并未考虑顶角修正的贡献, 这些

贡献是正确描述费米液体和非费米液体 (多通道情形下) 行为所必需的. 另外, 由式 (9.2.38) 和式 (9.2.39) 可以看出, NCA 忽略了任何相干自旋翻转和电荷转移过程, 而正是这些过程影响着温度低于 T_K 时的 Anderson 杂质复合体的量子相干的集合行为. 为此可考虑超出 NCA 的守恒 T 矩阵近似(参见文献：Kroha J, Wolfle P.//Senechal D, Tremblay A M, Bourbournais C. Theoretical Methods for Strongly Correlated Electrons: CRM Series in Mathematical Physics. New York: Springer, 2003).

第三节 动力学平均场方程

研究给定格位上的自由度与外部浴之间的相互作用, 可以采用多种不同的方法, 但这里我们只讨论一种最直观且简单的方法, 即所谓的空腔 (cavity) 法.

一、空腔法

在该方法中, 我们关注一个预先选定的格位 (取为格点 $i = \mathrm{O}$), 然后把所有其他格位上的自由度加以积分, 进而导出所选格位的一个有效动力学.

下面以 Hubbard 模型为例来说明, 其哈密顿为

$$\hat{H} = -\sum_{\langle i,j\rangle} t_{ij}\hat{c}_{i\sigma}^{+}\hat{c}_{j\sigma} + U\sum_{i}\hat{n}_{i\uparrow}\hat{n}_{i\downarrow} \tag{9.3.1}$$

其中, 重复的自旋指标 σ 自动求和.

体系的配分函数为

$$Z = \int\prod_{i,\sigma}\mathfrak{D}[c_{i\sigma}^{+}, c_{i\sigma}]\mathrm{e}^{-S} \tag{9.3.2}$$

其中, 作用量

$$S = \int_0^{\beta}\mathrm{d}\tau\left[\sum_i c_{i\sigma}^{+}\left(\partial_\tau - \mu\right)c_{i\sigma} - \sum_{ij} t_{ij}c_{i\sigma}^{+}c_{j\sigma} + U\sum_i n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}\right] \tag{9.3.3}$$

为了得到有效作用量 S_{eff}, 除所选格位 O 外, 所有其他格位上的费米子的 Grassmann 变量都要加以积分, 这样有

$$\frac{1}{Z_{\mathrm{eff}}}\mathrm{e}^{-S_{\mathrm{eff}}[c_{0\sigma}^{+}, c_{0\sigma}]} \equiv \frac{1}{Z}\int\prod_{i\neq 0,\sigma}\mathfrak{D}[c_{i\sigma}^{+}, c_{i\sigma}]\mathrm{e}^{-S} \tag{9.3.4}$$

将作用量 S 如下分解:

$$S = S_0 + \Delta S + S_{\mathrm{cavi}} \tag{9.3.5}$$

其中

$$S_0=\int_0^\beta \mathrm{d}\tau\left[c_{0\sigma}^+\left(\partial_\tau-\mu\right)c_{0\sigma}+Un_{0\uparrow}n_{0\downarrow}\right] \tag{9.3.6}$$

$$\Delta S=-\int_0^\beta \mathrm{d}\tau\sum_{i\neq 0}t_{i0}\left(c_{i\sigma}^+c_{0\sigma}+c_{0\sigma}^+c_{i\sigma}\right) \tag{9.3.7}$$

$$S_{\text{cavi}}=\int_0^\beta \mathrm{d}\tau\left[\sum_{i\neq 0}c_{i\sigma}^+\left(\partial_\tau-\mu\right)c_{i\sigma}-\sum_{i\neq 0,j\neq 0}t_{ij}c_{i\sigma}^+c_{j\sigma}+U\sum_{i\neq 0}n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}\right] \tag{9.3.8}$$

S_{cavi} 叫空腔作用量. 令 $\eta_i\equiv t_{i0}c_{0\sigma}$, 它起着耦合到 $c_{i\sigma}^+$ 的源的作用. 对 $i\neq 0$ 的费米子的积分将会得到空腔哈密顿的连通格林函数 g^{cavi} 的生成泛函：

$$\begin{aligned}S_{\text{eff}}=&S_0+\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{i_1\cdots j_n}\int \mathrm{d}\tau_{i_1}\cdots\mathrm{d}\tau_{j_n}\eta_{i_1}^+\cdots\eta_{i_n}^+\eta_{j_1}\cdots\eta_{j_n}\\&\cdot g_{i_1\cdots j_n}^{\text{cavi}}(\tau_{i_1}\cdots\tau_{i_n},\tau_{j_1}\cdots\tau_{j_n})+\text{const}\end{aligned} \tag{9.3.9}$$

二、无穷维极限下的标度行为

由于无限维空间中 DNFT 是精确的理论, 所以我们现在来讨论这一极限 ($d\to\infty$) 下, 物理量应如何定标. 在紧束缚近似下, 仅当 i,j 是最近邻格位时, $t_{ij}=t$. 其他情形下 $t_{ij}=0$. 考虑有单位格间距的 d 维**简单立方点阵**. 令 $(-t_{ij})$ 的傅里叶变换是 $\varepsilon_{\underline{k}}$, 即

$$\varepsilon_{\underline{k}}=\sum_{\langle i,j\rangle}(-t_{ij})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{k}\cdot(\underline{R}_i-\underline{R}_j)}=-\sum_l t\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{k}\cdot\underline{e}_l}+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{k}\cdot(-\underline{e}_l)}\right]=-2t\sum_{l=1}^{d}\cos k_l \tag{9.3.10}$$

其中, $\underline{e}_l(l=1,2,\cdots,d)$ 是格位 i 上的 d 根坐标轴上的单位矢量, $k_l=\underline{k}\cdot\underline{e}_l$. 对于 $d\to\infty$, 哈密顿中含 U 的在位相互作用项是有确切定义的, 这是因为该项与空间维数无关, 空间维数只和最近邻格位数相关. 但动能项中的迁徙速率不得不适当地定标以便产生一个非平庸的模型, 这点可以从 $U=0$ 时的相应态密度看出. 为了导出态密度, 我们先从中心极限定理出发.

设 $X=\dfrac{1}{N}\sum\limits_{\substack{i=1\\ \underline{x}_i\in P(\underline{x})}}f(\underline{x}_i)$, 其中, 变量 $\underline{x}_i\in P(\underline{x})$ 是指按概率分布函数 $P(\underline{x})$ 抽样. 当 $\underline{x}$ 按 $P(\underline{x})$ 分布时, 得到一个特定值 X 的概率为

$$\begin{aligned}&\int\prod_{i=1}^{N}\mathrm{d}^d x_i P(\underline{x}_i)\delta\left(\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}f(\underline{x}_j)-X\right)\\ &\xrightarrow[N=\infty]{\text{中心极限定理}}\sqrt{\frac{N}{2\pi\left(\langle f^2\rangle_P-\langle f\rangle_P^2\right)}}\mathrm{e}^{-\frac{(X-\langle f\rangle_P)^2}{\frac{2}{N}\left(\langle f^2\rangle_P-\langle f\rangle_P^2\right)}}\end{aligned}$$

其中, $\langle f\rangle_P \equiv \int \mathrm{d}^d x f(\underline{x})P(\underline{x})$.

现在再来看态密度 $D(\varepsilon)$.

因 $D(\varepsilon)=\int \frac{\mathrm{d}^d k}{(2\pi)^d}\delta(\varepsilon-\varepsilon_{\underline{k}})\equiv\langle\delta(\varepsilon-\varepsilon_{\underline{k}})\rangle_{P=1}$, 其中, $\langle\cdots\rangle_{P=1}$ 表示概率分布函数取 $P=1$ 时的平均. 利用式 (9.3.10), 则

$$D(\varepsilon)=\int \frac{\mathrm{d}^d k}{(2\pi)^d}\delta\left(\varepsilon-\frac{1}{d}\sum_{i=1}^{d}(-2td)\cos k_i\right)$$

注意: 在 $d\to\infty$ 的极限, $\cos k_i$ 可看成是在 $-1\sim 1$ 的随机数, 故 $\varepsilon_{\underline{k}}$ 的平均值和方差分别为

$$\langle\varepsilon_{\underline{k}}\rangle_{P=1}=-2t\sum_{i=1}^{d}\langle\cos k_i\rangle_{P=1}=0$$

$$\langle\varepsilon_{\underline{k}}^2\rangle_{P=1}=4t^2d^2\langle\cos^2 k_1\rangle=2t^2d^2$$

故由中心极限定理知在 $d\to\infty$ 时, 有

$$D(\varepsilon)\to\sqrt{\frac{d}{2\pi\left[\langle(2td)^2\cos^2 k_1\rangle_{P=1}\right]}}\mathrm{e}^{\frac{-\varepsilon^2}{\frac{2}{d}\left[\langle(2td)^2\cos^2 k_1\rangle_{P=1}\right]}}$$

从而得到

$$D(\varepsilon)=\sqrt{1/(4\pi t^2 d)}\mathrm{e}^{-\varepsilon^2/(4t^2 d)}$$

由上式看出, 仅当对 t 定标为 $t=t*/\sqrt{2d}$(其中, $t*=\mathrm{const}$) 才产生有限的态密度:

$$D(\varepsilon)=\frac{1}{t*\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{-\varepsilon^2/(2t*^2)} \tag{9.3.11}$$

从而对任意密度 $n_\uparrow, n_\downarrow$, 这种定标能导致无相互作用粒子有一个有限的平均动能 $\bar{\varepsilon}_{\mathrm{free}}(n_\uparrow,n_\downarrow)$, 任何其他的定标使得 $\bar{\varepsilon}_{\mathrm{free}}(n_\uparrow,n_\downarrow)$ 或者为零或者为无穷大, 这会让模型直接成为平庸. 所以 $d\to\infty$ 时应如下**定标**:

(1) 迁徙 t_{ij} 应定标为 $\left(\frac{1}{\sqrt{d}}\right)^{|i-j|}$(此时 i,j 是最近邻格点);

(2) g_{ij}^{cavi} 应定标为 $\left(\frac{1}{\sqrt{d}}\right)^{|i-j|}$.

由 t_{ij} 反映了从格点 i 到格点 j 的迁徙, 而 g_{ij}^{cavi} 是从格点 i 到格点 j 的传播子 (跃迁概率幅), 不难理解 g_{ij}^{cavi} 的定标方式.

三、动力学平均场方程

在式 (9.3.9) 中取 $n=1$, 则有

$$
\begin{aligned}
S_{\mathrm{eff}} &= S_0+\sum_{ij}\int \mathrm{d}\tau\mathrm{d}\tau'\eta_i^+(\tau)\eta_j(\tau')g_{ij}^{\mathrm{cavi}}(\tau,\tau') \\
&= \int_0^\beta \mathrm{d}\tau\left[c_{0\sigma}^+(\tau)\left(\partial_\tau-\mu\right)c_{0\sigma}(\tau)+Un_{0\uparrow}n_{0\downarrow}\right] \\
&\quad +\sum_{ij}\int \mathrm{d}\tau\mathrm{d}\tau' c_{0\sigma}^+ t_{0i}g_{ij}^{\mathrm{cavi}}(\tau-\tau')c_{0\sigma}t_{0j}
\end{aligned}
$$

故局域有效作用量约化为

$$
S_{\mathrm{eff}}=-\int_0^\beta \mathrm{d}\tau\mathrm{d}\tau' c_{0\sigma}^+(\tau)\Upsilon_0^{-1}(\tau-\tau')c_{0\sigma}(\tau')+U\int_0^\beta \mathrm{d}\tau n_{0\uparrow}(\tau)n_{0\downarrow}(\tau) \tag{9.3.12}
$$

其中

$$
\Upsilon_0^{-1}(\tau-\tau')=-(\partial_\tau-\mu)\delta(\tau-\tau')-\sum_{ij}t_{0i}t_{0j}g_{ij}^{\mathrm{cavi}}(\tau-\tau') \tag{9.3.13}
$$

Υ_0(被称为 Weiss 函数) 对于有效作用量 S_{eff} 起着裸格林函数的作用, 但不应将它与原来的点阵模型的无相互作用局域格林函数 g_0 相混淆. 式 (9.3.13) 的傅里叶变换为

$$
\begin{aligned}
\Upsilon_0^{-1}(\mathrm{i}\omega_n) &= \int_0^\beta \mathrm{d}\tau \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n(\tau-\tau')}\Upsilon_0^{-1}(\tau-\tau') \\
&= \int_0^\beta \mathrm{d}\tau\delta(\tau-\tau')(\partial_\tau+\mu)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n(\tau-\tau')}-\sum_{ij}t_{0i}t_{0j}g_{ij}^{\mathrm{cavi}}(\mathrm{i}\omega_n)
\end{aligned}
$$

其中, 最后一个等式中的第一项使用了分部积分.

$$
\Upsilon_0^{-1}(\mathrm{i}\omega_n)=\mathrm{i}\omega_n+\mu-\sum_{ij}t_{0i}t_{0j}g_{ij}^{\mathrm{cavi}}(\mathrm{i}\omega_n) \tag{9.3.14}
$$

这个表达式把 Υ_0 和去掉一个格位 O 的 Hubbard 模型的格林函数 g_{ij}^{cavi} 联系起来. 为了得到一个封闭的方程组, 还需把后者与原来的未去掉格位 O 的点阵的格林函数相联系; 若取 $d\to\infty$ 的极限就能做到这一点.

现在考虑点阵是 **Bethe 点阵**的情形 (图 9.3.1).

由于一旦去掉格位 O, 则 O 点的近邻格点就不再是连通的了, 注意到 g_{ij}^{cavi} 是连通格林函数, 所以式 (9.3.14) 的求和只能被限制到 $j=i$ 的情形. **另外, 在$d\to\infty$时去掉一个格位不会改变格林函数,** 所以 $g_{ii}^{\mathrm{cavi}}=g_{ii}$. 再运用平移不变性, 就可得到适用于 Bethe 点阵的公式:

$$
\Upsilon_0^{-1}(\mathrm{i}\omega_n)=\mathrm{i}\omega_n+\mu-t^2g_{ii}(\mathrm{i}\omega_n) \tag{9.3.15}
$$

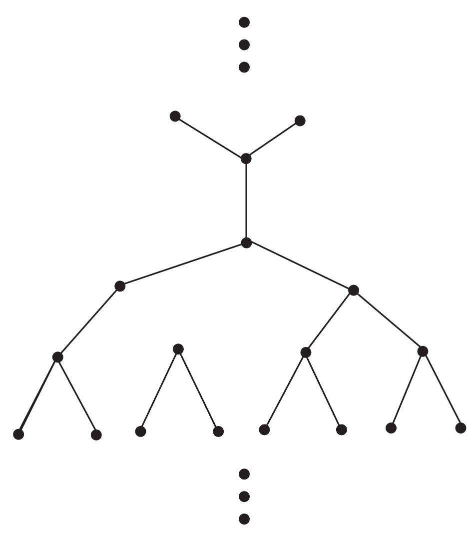


图 9.3.1 Bethe 点阵

对于**一般点阵**有

$$g_{ij}^{\text{cavi}} = g_{ij} - \frac{g_{i0}g_{0j}}{g_{00}} \tag{9.3.16}$$

其中, g_{00} 包含从格位 O 出发最后回到格位 O 的任意路径; 格位 g_{0j} 包含从格位 j 出发最后回到格位 O 的任意路径; g_{i0} 包含从格位 O 出发最后回到格位 i 的任意路径; g_{ij} 是原来的点阵 (未去掉格位 O 时) 的格林函数, 它包含从 j 出发最后回到 i 的任意路径.

显然贡献给 g_{ij} 而不是给 g_{ij}^{cavi} 的额外路径是通过格位 O 来连接 i 与 j 的路径. 在 $d \to \infty$ 的极限下, 仅一次通过 O 的路径才被考虑 (若是二次通过, 则与 d^2 联系, 为高阶无穷), 它的贡献显然正比于 $g_{i0}g_{0j}$, 但还应除以 g_{00} 以使从离开 O 和回到 O 的路径只计及一次.

将式 (9.3.16) 插入式 (9.3.14), 得

$$\Upsilon_0^{-1}(\mathrm{i}\omega_n) = \mathrm{i}\omega_n + \mu - \sum_{ij} t_{0i}t_{0j}g_{ij} + \frac{\left(\sum_i t_{i0}g_{i0}\right)^2}{g_{00}} \tag{9.3.17}$$

注意到原始点阵的 Hubbard 模型的单粒子格林函数

$$g_{ij}(\tau - \tau') \equiv -\langle T\hat{c}_{i\sigma}(\tau)\hat{c}_{j\sigma}^{+}(\tau')\rangle$$

的傅里叶变换 (参见式 (3.3.12) 和式 (3.3.13)) 为

$$g(\underline{k}, \mathrm{i}\omega_n) = \frac{1}{\mathrm{i}\omega_n + \mu - \varepsilon_{\underline{k}} - \Sigma(\mathrm{i}\omega_n)} \equiv \frac{1}{\varsigma - \varepsilon_{\underline{k}}} \tag{9.3.18}$$

其中

$$\varepsilon_{\underline{k}} \equiv \sum_{ij} t_{ij} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\underline{k}\cdot(\underline{R}_i - \underline{R}_j)} \tag{9.3.19}$$

$$\varsigma \equiv \mathrm{i}\omega_n + \mu - \Sigma(\mathrm{i}\omega_n) \tag{9.3.20}$$

且**自能**Σ**与动量无关**. 再令**无相互作用态密度**为 $\boldsymbol{D(\varepsilon)}$, 则

$$D(\varepsilon) = \sum_{\underline{k}} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\underline{k}}) \tag{9.3.21}$$

则式 (9.3.17) 中右端最后两项可写成

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\varepsilon D(\varepsilon) \frac{\varepsilon^2}{\varsigma - \varepsilon} - \frac{\left[\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\varepsilon D(\varepsilon) \frac{\varepsilon}{\varsigma - \varepsilon}\right]^2}{\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\varepsilon D(\varepsilon) \frac{1}{\varsigma - \varepsilon}}$$

又由于

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\varepsilon D(\varepsilon) \frac{\varepsilon^2}{\varsigma - \varepsilon} = \varsigma \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\varepsilon \frac{D(\varepsilon)\varepsilon}{\varsigma - \varepsilon}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\varepsilon \frac{D(\varepsilon)\varepsilon}{\varsigma - \varepsilon} = -1 + \varsigma \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\varepsilon \frac{D(\varepsilon)}{\varsigma - \varepsilon}$$

其中已利用了

$$0 \equiv t_{00} = \sum_{\underline{k}} t_{\underline{k}} = \int \mathrm{d}\varepsilon D(\varepsilon)\varepsilon$$

这样由式 (9.3.17) 可得

$$\begin{aligned} \Upsilon_0^{-1}(\mathrm{i}\omega_n) &= \mathrm{i}\omega_n + \mu - \varsigma + \frac{1}{\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\varepsilon \frac{D(\varepsilon)}{\varsigma - \varepsilon}} \\ &= \Sigma(\mathrm{i}\omega_n) + \frac{1}{\tilde{D}(\varsigma)} \end{aligned} \tag{9.3.22}$$

其中

$$\tilde{D}(\varsigma) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\varepsilon \frac{D(\varepsilon)}{\varsigma - \varepsilon} \tag{9.3.23}$$

称为 $D(\varepsilon)$ 的 **Hilbert 变换**. 再定义**倒格函数**$\mathfrak{R}$**:**

$$\mathfrak{R}[\tilde{D}(\zeta)] = \zeta \tag{9.3.24}$$

注意: 原始点阵的局域格林函数 (记为 g_{loc}, 在不混淆情形下可简单记为 g) 为

$$\begin{aligned} g(\mathrm{i}\omega_n) \equiv g_{ii}(\mathrm{i}\omega_n) &= \sum_{\underline{k}} g(\underline{k}, \mathrm{i}\omega_n) = \sum_{\underline{k}} \frac{1}{\mathrm{i}\omega_n + \mu - \varepsilon_{\underline{k}} - \varSigma(\mathrm{i}\omega_n)} \\ &= \tilde{D}(\mathrm{i}\omega_n + \mu - \varSigma(\mathrm{i}\omega_n)) \end{aligned} \tag{9.3.25}$$

这样由式 (9.3.22) 可得

$$\varUpsilon_0^{-1}(\mathrm{i}\omega_n) = \mathrm{i}\omega_n + \mu + [g(\mathrm{i}\omega_n)]^{-1} - \Re\,[g(\mathrm{i}\omega_n)] \tag{9.3.26}$$

以及

$$\varSigma(\mathrm{i}\omega_n) = \varUpsilon_0^{-1}(\mathrm{i}\omega_n) - g^{-1}(\mathrm{i}\omega_n) \tag{9.3.27}$$

式 (9.3.26) 被称为**自洽条件,** 它是获得平均场方程的完备集所必需的.

注意任何情形都可由式 (9.3.25) 和式 (9.3.27) 导出式 (9.3.26), 因而和自洽条件是等价的.

四、局域有效作用量的哈密顿表示

局域作用量 S_{eff} 的哈密顿表示有一定的任意性. 这里我们只讨论 Hubbard 模型的 LISA 途径如何将点阵模型映射成嵌入自洽介质中的 Anderson 单杂质模型, 其哈密顿表示为 H_{AM}:

$$\hat{H}_{\text{AM}} = \sum_{l\neq 0} \tilde{\varepsilon}_l \hat{c}_{l\sigma}^+ \hat{c}_{l\sigma} + \sum_{l\neq 0} V_l \left(\hat{c}_{l\sigma}^+ \hat{c}_{0\sigma} + \text{h.c.}\right) - \mu \hat{c}_{0\sigma}^+ \hat{c}_{0\sigma} + U \hat{n}_{0\uparrow} \hat{n}_{0\downarrow} \tag{9.3.28}$$

其中, 重复自旋指标自动求和; 另外, 将 $(\hat{c}_{0\sigma}, \hat{c}_{0\sigma}^+)$ 看成杂质轨道, 并且将热浴 $(\hat{c}_{l\sigma}, \hat{c}_{l\sigma}^+)$ 看成导带. 由于哈密顿在 $\hat{c}_{l\sigma}, \hat{c}_{l\sigma}^+$ 上是二次的, 所以可以进行高斯型的积分. 由式 (9.2.4) 知, 我们来计算 $\displaystyle\int \prod_{l\neq 0,\sigma} \mathfrak{D}[c_{l\sigma}^+, c_{l\sigma}] \mathrm{e}^{-S}$, 其中, 作用量 S 为

$$\begin{aligned} S = -\int_0^\beta \mathrm{d}\tau \Big[&\sum_{l\neq 0} c_{l\sigma}^+(\tau)(\partial_\tau + \tilde{\varepsilon}_l) c_{l\sigma}(\tau) + c_{0\sigma}^+(\tau)(\partial_\tau - \mu) c_{0\sigma}(\tau) \\ &+ \sum_{l\neq 0} V_l \left(c_{l\sigma}^+(\tau) c_{0\sigma}(\tau) + \text{h.c.}\right) + U \hat{n}_{0\uparrow}(\tau) \hat{n}_{0\downarrow}(\tau) \Big] \end{aligned} \tag{9.3.29}$$

利用附录 7A 中的泛函积分公式, 得

$$\begin{aligned} \int \prod_{l\neq 0,\sigma} \mathfrak{D}[c_{l\sigma}^+, c_{l\sigma}] \mathrm{e}^{-S} \sim \exp\bigg\{ -\int_0^\beta \mathrm{d}\tau \Big[&c_{0\sigma}^+(\tau)(\partial_\tau - \mu) c_{0\sigma}(\tau) \\ &+ U \hat{n}_{0\uparrow}(\tau) \hat{n}_{0\downarrow}(\tau) - \sum_{l\neq 0} V_l c_{0\sigma}^+(\tau) \left(\partial_\tau + \tilde{\varepsilon}_l\right)^{-1} V_l c_{0\sigma}(\tau) \Big] \bigg\} \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= \exp\left\{ -\int_0^\beta \mathrm{d}\tau \left[c_{0\sigma}^+(\tau) \left(\partial_\tau - \mu - \sum_l \frac{V_l^2}{\partial_l + \tilde{\varepsilon}_l} \right) c_{0\sigma}(\tau) \right.\right. \\
&\quad \left.\left. + U\hat{n}_{0\uparrow}(\tau)\hat{n}_{0\downarrow}(\tau) \right] \right\} \sim \mathrm{e}^{-S_{\text{eff}}} \Rightarrow \\
&S_{\text{eff}} = \int_0^\beta \mathrm{d}\tau \left[c_{0\sigma}^+(\tau) \left(\partial_\tau - \mu - \sum_l \frac{V_l^2}{\partial_l + \tilde{\varepsilon}_l} \right) c_{0\sigma}(\tau) \right. \\
&\quad \left. + U\hat{n}_{0\uparrow}(\tau)\hat{n}_{0\downarrow}(\tau) \right]
\end{aligned}
$$

对比式 (9.3.12), 知

$$
\varUpsilon_0(\tau-\tau') = -\left(\partial_\tau - \mu - \sum_l \frac{V_l^2}{\partial_l + \tilde{\varepsilon}_l} \right)^{-1} \delta(\tau-\tau') \tag{9.3.30}
$$

即

$$
\left(\partial_\tau - \mu - \sum_l \frac{V_l^2}{\partial_l + \tilde{\varepsilon}_l} \right) \varUpsilon_0(\tau-\tau') = -\delta(\tau-\tau') \tag{9.3.31}
$$

因

$$
\varUpsilon_0(\tau-\tau') = \frac{1}{\beta}\sum_n \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_n(\tau-\tau')}\varUpsilon_0(\mathrm{i}\omega_n)
$$

故代入式 (9.3.30) 得

$$
\left(\mathrm{i}\omega_n + \mu - \sum_l \frac{V_l^2}{\partial_l + \tilde{\varepsilon}_l} \right) \varUpsilon_0(\mathrm{i}\omega_n) = 1
$$

所以

$$
\begin{aligned}
\varUpsilon_0^{-1}(\mathrm{i}\omega_n) &= \mathrm{i}\omega_n + \mu - \sum_l \frac{V_l^2}{\mathrm{i}\omega_n + \tilde{\varepsilon}_l} \\
&= \mathrm{i}\omega_n + \mu - \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega \frac{\varDelta(\omega)}{\mathrm{i}\omega_n - \omega}
\end{aligned} \tag{9.3.32}
$$

其中

$$
\varDelta(\omega) = \sum_l V_l^2 \delta(\omega - \tilde{\varepsilon}_l) \tag{9.3.33}
$$

五、无限维中微扰论的局域性质

我们现在来证明在无限维中自能的确与动量无关, 而只依赖于频率. 这是因为当 $d \to \infty$ 时, 能由三条或三条以上路径连通的任何两个内部顶点 (i, j), 只有当

$i=j$ 时贡献才存在. 此时这两个格位可坍缩成一个格位. 这个性质可由幂次计数法来解释. 仍然以 Hubbard 模型为例, 因为迁徙被定标为 $\dfrac{1}{\sqrt{d}}$, 连接 i 和 j 的费米子传播子的每条路径将涉及至少一个因子$\left(\dfrac{1}{\sqrt{d}}\right)^{|i-j|}$, 其中, $|i-j|\equiv R$ 称为格位 i 和 j 之间的 Manhattan 距离, 从 i 到 j 要经过 R 个其他格位. 另外, 当 i 被固定时, 最终还要将对其他 R 个内部顶点 (格位) 求和 $\sum\limits_{l=1}^{d}\cdots$, 这样的求和将带来一个因子 d^R. 因此可得到一个整体因子$d^R\left(\dfrac{1}{\sqrt{d}}\right)^{RP_{ij}}$, 其中, P_{ij} 是连接 i 和 j 的独立路径数. 这样若 $P_{ij}\geqslant 3$, 则只有 $i=j$(即 $R=0$) 才会有贡献.

一旦两个顶点 i 和 j 能坍缩成一点, 则可忽略在顶点上的动量守恒, 将连接它们的费米传播子 $g^0(\underline{k},\mathrm{i}\omega_n)$ 由它们的局部 (即与 $\underline{k}$ 无关的) 传播子代替：$g^0_{ii}(\mathrm{i}\omega_n)\equiv\sum\limits_{\underline{k}}g^0(\underline{k},\mathrm{i}\omega_n)$, 但仍保留频率守恒.

由上述分析不难得知, 图 9.3.2 中的二阶及四阶自能图可坍缩成一个格位. 但图 9.3.3 中的四阶自能图却不能坍缩成一个格位, 因为仅有两条独立路径连接 i 和 k(或 j 和 l).

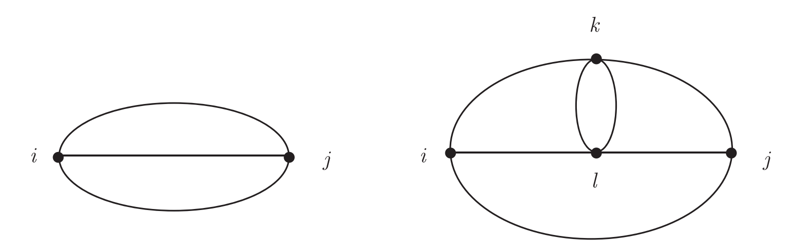


图 9.3.2　能坍缩成一个格位的图

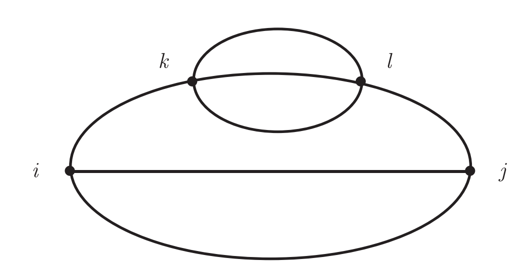


图 9.3.3　不能坍缩成一个格位的图

不过, 图 9.3.2 中的两个图是骨架图, 而图 9.3.3 中的图却不是骨架图 (参见第三章第四节). 容易看到一个骨架图的两个内部顶点总能由三条或三条以上的路

径相连, 使得在骨架微扰展开中, 贡献给自能的所有图能坍缩成一个格位. 注意到 Luttinger-Ward 泛函 Φ 本身就是由所有从真空到真空的骨架图形构成的, 因而在 $d \to \infty$ 时 Φ 可写成如下形式：

$$\Phi = \sum_i \phi\left[g_{ii}\right] \tag{9.3.34}$$

其中, ϕ 只是在格位 i 上的局域格林函数 g_{ii} 的泛函. 另外, 我们知道 (参见式 (3.4.10)), 自能可以作为 Luttinger-Ward 泛函的泛函导数而得到:

$$\Sigma_{ij}(\mathrm{i}\omega_n) \sim \frac{\delta\Phi}{\delta g_{ij}(\mathrm{i}\omega_n)} \tag{9.3.35}$$

这样由式 (9.3.34) 可以看出自能应是格位对角的, 且与动量无关.

$$\Sigma_{ij}(\mathrm{i}\omega_n) = \delta_{ij}\Sigma(\mathrm{i}\omega_n) \tag{9.3.36}$$

六、长程有序相的 DMFT

在前面建立 DMFT 方程时, 我们没有考虑长程有序. 但 DMFT 方程可以容易地加以拓广使之能研究有长程序的相, 可计算成序的临界温度和相图. 下面仅以与磁性有关的情形为例.

首先考虑铁磁长程序. 在有磁场与自旋相耦合的情形, 或存在自发磁化时, 自旋向上和向下的电子的格林函数不等价, 因而必须保留局域格林函数及 Weiss 函数对自旋的依赖关系. 为简单起见, 我们仅考虑均匀磁场 h. 此时处于铁磁相的 Hubbard 模型中的局域有效作用量为

$$S_{\mathrm{eff}} = -\int_0^\beta \mathrm{d}\tau\mathrm{d}\tau' c_{0\sigma}^+(\tau)\Upsilon_{0\sigma}^{-1}(\tau-\tau')c_{0\sigma}(\tau') + U\int_0^\beta \mathrm{d}\tau n_{0\uparrow}(\tau)n_{0\downarrow}(\tau) \tag{9.3.37}$$

自洽方程为

$$g_\sigma(\mathrm{i}\omega_n) = \sum_{\underline{k}} \frac{1}{\mathrm{i}\omega_n + \mu + h\sigma - \varepsilon_{\underline{k}} - \Sigma_\sigma(\mathrm{i}\omega_n)} \tag{9.3.38}$$

及

$$\Sigma_\sigma(\mathrm{i}\omega_n) = \Upsilon_{0\sigma}^{-1}(\mathrm{i}\omega_n) - g_\sigma^{-1}(\mathrm{i}\omega_n) \tag{9.3.39}$$

而作为外磁场函数的磁化 m 为 (参见式 (3.4.7))

$$m = \frac{1}{\beta}\sum_n \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n 0^+}\left[g_\uparrow(\mathrm{i}\omega_n) - g_\downarrow(\mathrm{i}\omega_n)\right] \tag{9.3.40}$$

若 h 为零时仍有非零的自发磁化就意味着铁磁相.

现在考虑反铁磁长程序. 虽然对于无公度磁序, 在一般情形中的有序相内, 没有简单的动力学平均场方程组可以写出, 但此时可用本章第四节方法转而去研究磁化率. 而对于有公度性的反铁磁长程序, 却能较容易地给出它的 DMFT 方程. 注意的是在 $d \to \infty$ 的极限的特殊性, 其中缺乏长波长自旋波激发, 且在一些常用的简单近似下, 能在单粒子谱中出现一个能隙. 但是对于研究强关联顺磁金属和有自旋密度波序的金属之间的量子转变, LISA 方法已被证明是有用的, 并且可期待某些结果在有限维时也能成立.

在反铁磁 Néel 相情形, 一个给定自旋的最近邻的自旋与它反平行, 因而整个点阵能分成两个互插的子点阵 A 和 B. 这两个子点阵的局域格林函数分别为 $g_{A\sigma}$ 和 $g_{B\sigma}$. 显然有

$$g_{A\sigma}(\mathrm{i}\omega_n) = g_{B,-\sigma}(\mathrm{i}\omega_n) \tag{9.3.41}$$

同样, 自能也是与动量无关的局域函数, 满足

$$\Sigma_{A\sigma}(\mathrm{i}\omega_n) = \Sigma_{B,-\sigma}(\mathrm{i}\omega_n) \tag{9.3.42}$$

在 $d \to \infty$ 时, Luttinger-Ward 泛函 $\varPhi$ 是 $g_{A\sigma}$ 和 $g_{B\sigma}$ 的泛函：

$$\varPhi = \varPhi[g_{A\sigma}, g_{B\sigma}] \tag{9.3.43}$$

动力学平均场方程容易推广到有这种长程序的情形. 仍以 Hubbard 模型为例, 但此时要考虑有交错磁场存在的情形, 其哈密顿为

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + U\sum_i \hat{n}_{i\uparrow}\hat{n}_{i\downarrow}$$

其中

$$\hat{H}_0 = \sum_{\underline{k}} \varepsilon_{\underline{k}} \left(\hat{c}^+_{A\underline{k}\sigma}\hat{c}_{B\underline{k}\sigma} + \hat{c}^+_{B\underline{k}\sigma}\hat{c}_{A\underline{k}\sigma}\right) + \sum_{\underline{k}} \sigma h_{\mathrm{s}} \left(\hat{c}^+_{A\underline{k}\sigma}\hat{c}_{A\underline{k}\sigma} - \hat{c}^+_{B\underline{k}\sigma}\hat{c}_{B\underline{k}\sigma}\right) \tag{9.3.44}$$

式中, $\underline{k}$ 位于简约布里渊区; 等号右端第一求和项为迁徙项, 而第二求和项则反映了交错磁场 h_{s} 的效应. 体系的格林函数是如下矩阵的逆:

$$(\mathrm{i}\omega_n + \mu)I_{2\times 2} - \begin{pmatrix} \sigma h_{\mathrm{s}} & \varepsilon_{\underline{k}} \\ \varepsilon_{\underline{k}} & -\sigma h_{\mathrm{s}} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \Sigma_{A\sigma} & 0 \\ 0 & \Sigma_{B\sigma} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varsigma_{A\sigma} & -\varepsilon_{\underline{k}} \\ -\varepsilon_{\underline{k}} & \varsigma_{B\sigma} \end{pmatrix} \tag{9.3.45}$$

其中

$$\begin{cases} \varsigma_{A\sigma} = \mathrm{i}\omega_n + \mu - \sigma h_{\mathrm{s}} - \Sigma_{A\sigma} \\ \varsigma_{B\sigma} = \mathrm{i}\omega_n + \mu + \sigma h_{\mathrm{s}} - \Sigma_{B\sigma} \end{cases} \tag{9.3.46}$$

和 Hubbard 模型对应的杂质模型仍满足式 (9.3.37). 但此时的自洽条件却被证明是 (参见 Brandt U, Mielsch C. Z. Phys., 1990, 79: 295; 1991, 82: 37)

$$g_{\alpha\sigma} = \varsigma_{\bar{\alpha}\sigma} \sum_{\underline{k}} \frac{1}{\varsigma_{A\sigma}\varsigma_{B\sigma} - \varepsilon_{\underline{k}}^2} \tag{9.3.47}$$

其中, $\alpha = A, B$; $\bar{\alpha} = B, A$.

利用配位数 $z \to \infty$ 且有最近邻迁徙 $t_{ij} = t/\sqrt{z}$ 的 Bethe 点阵的态密度 (参见 Economou E N. Green's Functions in Quantum Physics. Berlin: Springer-Verlag, 1983)

$$D(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi t^2}\sqrt{4t^2 - \varepsilon^2} \quad (|\varepsilon| < 2t) \tag{9.3.48}$$

则式 (9.3.47) 得

$$g_{\alpha\sigma} = \varsigma_{\bar{\alpha}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\varepsilon \frac{D(\varepsilon)}{\varsigma_{A\sigma}\varsigma_{B\sigma} - \varepsilon^2}$$

将式 (9.3.48) 代入上式, 设 $\varsigma \equiv \varsigma_A\varsigma_B > 4t^2$, 则得到

$$g_{\alpha\sigma} = \frac{\varsigma_{\bar{\alpha}\sigma}}{\pi(\varsigma - 2t^2)} \int_0^{\pi} \mathrm{d}x \frac{1 + \cos x}{1 + a\cos x}$$

其中, $a = 2t^2/(\varsigma - 2t^2)$, $\quad a^2 < 1$.

利用公式

$$\int_0^{\pi} \mathrm{d}x \frac{\cos nx}{1 + a\cos x} = \frac{\pi}{\sqrt{1 - a^2}} \left(\frac{\sqrt{1 - a^2} - 1}{a}\right)^n$$

可以得到

$$g_{\alpha\sigma} = \frac{\varsigma_{\bar{\alpha}\sigma}}{2t^2}\left(1 - \sqrt{\frac{\varsigma - 4t^2}{\varsigma}}\right)$$

进而有

$$\varsigma_{A\sigma} g_{A\sigma} = t^2 g_{A\sigma} g_{B\sigma} + 1$$

又由于 Weiss 函数满足

$$\Upsilon_{0,\sigma}^{-1} = g_{A\sigma}^{-1} + \Sigma_{A\sigma} \tag{9.3.49}$$

故对于 Bethe 点阵, Weiss 函数和局域格林函数的自洽关系为

$$\Upsilon_{0,\sigma}^{-1} = \mathrm{i}\omega_n + \mu - \sigma h_{\mathrm{s}} - t^2 g_{A,-\sigma} \tag{9.3.50}$$

其中, 参考点 O 选在点阵 A 中.

七、DMFT 的拓广：集团近似

前面所讨论的 DMFT 方法中, 仅考虑了在一个平均了的环境 (动力学平均场) 中只有局域关联的单个格点. 这使得自能 $\Sigma(\omega)$ 是局域的而与动量 $\underline{k}$ 无关. 然而在某些问题中, 非局域关联是重要的. 事实上, 格位自能依赖于 $\underline{k}$ 是高 T_{C} 铜酸盐的任何理论的一个重要组成部分. 在相变附近的涨落、在两个邻近格点之间的自旋单态的形成、在重费米子化合物中 RKKY 相互作用与 Kondo 效应的竞争等, 非局域关联很重要的. 由于建立在 LISA 基础上的 DMFT 忽略了这种非局域关联, 所以拓广 DMFT 使之能计及非局域关联是必要的. 不过我们希望有关的关联长度较短, 从而只需计及短程涨落, 这样我们可以寻求一个建立在准局域观点之上的途径. 这意味着我们可以把局域性概念从限制于单个格点拓广到一个格点集团 (cluster)：处在一个平均环境中的含有多个格点的 **DMFT 胞**(**超元胞**). DMFT 胞原则上可以任意选取, 可以有任意的形状, 而不必与能带结构计算中所选元胞 (LDA 元胞) 相同.

一旦采用集团描述, 那些不能用单一格点描述的某些有序态 (如 d-波超导) 就能加以刻画研究. 在集团内部的非局域相互作用的效应 (如次近邻库仑排斥作用) 就能加以调查. 并且通过调整集团尺度, 就能系统地任意改进 DMFT 的准确度.

文献中已研究了多种集团方法, 它们的区别在于自洽条件 (如何从集团量来计算 Weiss 浴) 以及格位上自能对动量依赖性的参数化.

在**集团 DMFT**途径中, 若相互作用格位 i 和 j 在同一 DMFT 胞中, 就要计及它们的非局域关联 $\Sigma_{iljm}(\omega)$; 若 i 和 j 是在不同的 DMFT 胞中, 就要忽略它们之间的关联.

集团 DMFT(CDMFT) 能在实空间中很好地加以理解. 而另一种途径, 称为**动力学集团近似**(**DCA**), 是从动量空间出发导出集团方程. 我们知道 DMFT 自能对所有 $\underline{k}$ 矢量都是常数, 与 DMFT 不同, 在 DCA 中将布里渊区分成若干块, 其自能仅在每块中是常数. 在实空间中, DCA 集团有周期性边界条件而不是 CDMFT 的开放边界条件. 此外, DMFT 是耦合到每个格位而 CDMFT 是耦合到集团边界的格位上.

DCA 途径、CDMFT 和周期性集团DMFT(**PCDMFT**) 途径的自洽条件能总结成如下相同的矩阵方程：

$$G_0^{-1}(\mathrm{i}\omega_n)=\Sigma^C(\mathrm{i}\omega_n)+\left[\sum_{K\in\mathrm{RBZ}}\frac{1}{\mathrm{i}\omega_n+\mu-\boldsymbol{t}_{\mathrm{S}}(K)-\Sigma_{\mathrm{S}}(K,\mathrm{i}\omega_n)}\right]^{-1}$$

其中, K 取值于超元胞形成的超晶格的约化布里渊区 (RBZ). 上述三种途径的区别反映在 $\boldsymbol{t}_{\mathrm{S}}$ 和 Σ_{S} 的取值上. 对于 CDMFT 途径, 应取 $\boldsymbol{t}_{\mathrm{S}}(K)$ 为超元胞之间的迁徙矩阵 $\boldsymbol{t}(K)$, 而 $\Sigma_S(K,\mathrm{i}\omega_n)$ 应取为集团自能 $\Sigma^{\mathrm{C}}(\mathrm{i}\omega_n)$. 对于 PCDMFT, 则应取

$\boldsymbol{t}_{\mathrm{S}}(K)=\boldsymbol{t}(K)$, $\Sigma_{\mathrm{S}}=\Sigma_{\mathrm{latt}}$(其中, Σ_{latt} 为格点自能). 对于 DCA, 则取

$$\boldsymbol{t}_{\mathrm{S}}(K)=\boldsymbol{t}_{\mu\nu}(K)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}K(\mu-\nu)},\quad \Sigma_{\mathrm{S}}(K,\mathrm{i}\omega_n)=\Sigma^{\mathrm{C}}(\mathrm{i}\omega_n).$$

有关各种途径及其应用的详细评述参见文献 (Maier T, Jarrell M, Pruschke T, et al. Electronic Archive. xxx. lanl. gov. cond-mat/0404055).

第四节　响应函数和 DMFT 的计算程序

在 DMFT 中, 响应和关联函数能借助于原来点阵的格林函数和杂质模型顶角函数来表达. 它们对动量的依赖是通过原来点阵的格林函数来实现的.

一、无限维中关联函数的局域性

关联函数的梯形分解 (参见第六章第三节) 在无限维极限中能获得极大的简化. 这是因为在关联函数的梯形展开级数中, 二粒子不可约顶角函数 $\Gamma^{\sigma\sigma'}_{\underline{k}\underline{k}'\underline{q}}(\mathrm{i}\omega,\mathrm{i}\omega';\mathrm{i}\nu)$ 能被一个纯粹的局域量 $\Gamma^{\sigma\sigma'}(\mathrm{i}\omega,\mathrm{i}\omega';\mathrm{i}\nu)$ 所替代, 它与动量无关而只依赖于频率. 这个结果同样可由前面所介绍的幂次计数法则来判断. 事实上, 由于在梯形展开级数的实空间表示中, 位于同一个顶角内部的任何两个格位一定由多于两条独立路径相连. 若不是这样, 这个图就会通过截断两条内部传播子后而成为不连通图, 这将与 Γ 是二粒子不可约的假设相矛盾了.

作为这个简化的结果, 我们可以在每个粒子–空穴胞 (bubble) 中独立地去执行对动量的求和. 注意: 虽然可忽略在顶角 Γ 处的动量守恒, 但必须完全计及频率守恒.

二、光导

现在我们将以上结果应用到超立方点阵中的光导 $\sigma(\underline{q}=0,\omega)$ 的计算上, 所依据的公式是式 (6.2.25). 由于在虚时关联函数的费曼图中, 它的流顶角 (参见式 (6.3.27)) 为 $-ek^a/m$, 而按式 (9.3.10) 知

$$-e\frac{k^a}{m}=-e\frac{\partial\varepsilon_k}{\partial k^a}=-2et\sin k^a \tag{9.4.1}$$

注意到此时虚时关联函数的梯形分解级数 (6.3.29)(在 $\underline{q}=0$ 时) 有如下特性：①流顶角在宇称变换 $\underline{k}\to-\underline{k}$ 下是奇函数; ②二粒子不可约顶角函数 Γ 与动量无关; ③其他与 $\underline{k}$ 有关的量仅是蕴含在松原函数中的 $\varepsilon_{\underline{k}}$, 但 $\varepsilon_{\underline{k}}$ 在宇称下是偶函数. 这样导致在计算光导时, 可以将所有顶角 Γ 修正项 (它要对 $\underline{k}$ 求和) 从流–流虚时关联函数中去掉. 也就是说, 它的费曼图中只有基本的粒子–空穴胞存在.

这样, 按照式 (6.3.30), 有

$$
\begin{aligned}
\chi_{ab}(\mathrm{i}\omega_n) &= -\frac{1}{\beta}\frac{2e^2}{m^2}\sum_{k,r} k^a k^b g(\underline{k},\mathrm{i}\omega_r)g(\underline{k},\mathrm{i}\omega_r+\mathrm{i}\omega_n) \\
&= \frac{-8e^2t^2}{\beta}\sum_{k,r}\sin k_a \sin k_b g(\underline{k},\mathrm{i}\omega_r)g(\underline{k},\mathrm{i}\omega_r+\mathrm{i}\omega_n)
\end{aligned}
\tag{9.4.2}
$$

对各项同性情形, 有

$$
\chi(\mathrm{i}\omega_n) = \frac{-8e^2t^2}{\beta}\sum_{k,r}\frac{1}{d}\sum_{l=1}^{d}\sin^2(k_l)g(\underline{k},\mathrm{i}\omega_r)g(\underline{k},\mathrm{i}\omega_r+\mathrm{i}\omega_n)
$$

注意到格林函数 $g(\underline{k},\mathrm{i}\omega_r)$ 是仅通过 $\varepsilon_{\underline{k}}$ 而依赖于 $\underline{k}$ 的. 故可将上式写成

$$
\chi(\mathrm{i}\omega_n) = \frac{-8e^2t^2}{\beta d}\sum_{r}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\varepsilon\sum_{\underline{k}}\sum_{l=1}^{d}\sin^2(k_l)\delta(\varepsilon-\varepsilon_{\underline{k}})g(\varepsilon,\mathrm{i}\omega_r)g(\varepsilon,\mathrm{i}\omega_r+\mathrm{i}\omega_n)
$$

利用 $d\to\infty$ 时, $\dfrac{1}{d}\displaystyle\sum_{l=1}^{d}\sin^2(k_l)\approx\dfrac{1}{2}$, 以及态密度 $D(\varepsilon)\equiv\dfrac{1}{V}\displaystyle\sum_{\underline{k}}\delta(\varepsilon-\varepsilon_{\underline{k}})$, 有

$$
\chi(\mathrm{i}\omega_n) = \frac{-4e^2t^2V}{\beta}\sum_{r}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\varepsilon D(\varepsilon)g(\varepsilon,\mathrm{i}\omega_r)g(\varepsilon,\mathrm{i}\omega_r+\mathrm{i}\omega_n)
\tag{9.4.3}
$$

利用泊松求和公式以及单粒子谱密度 $A(\varepsilon,\nu)=-\dfrac{1}{\pi}\mathrm{Im}g(\varepsilon,\nu+\mathrm{i}0^+)$, 有

$$
\chi(\mathrm{i}\omega_n) = -4e^2t^2V\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\varepsilon D(\varepsilon)\oint\frac{\mathrm{d}z}{(-2\pi\mathrm{i})}n_{\mathrm{F}}(z)\int\mathrm{d}\nu\mathrm{d}\nu'\frac{A(\varepsilon,\nu)}{z-\nu}\frac{A(\varepsilon,\nu')}{z+\mathrm{i}\omega_n-\nu'}
$$

对 z 积分, 注意换围道并用残数定理, 可得

$$
\chi(\mathrm{i}\omega_n) = -4e^2t^2V\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\varepsilon D(\varepsilon)\int\mathrm{d}\nu\mathrm{d}\nu' A(\varepsilon,\nu)A(\varepsilon,\nu')\frac{n_{\mathrm{F}}(\nu)-n_{\mathrm{F}}(\nu')}{\nu+\mathrm{i}\omega_n-\nu'}
$$

作解析延拓：$\mathrm{i}\omega_n\to\omega+\mathrm{i}0^+$, 并利用式 (6.2.25), 其中, 右边第二项贡献为零. 所以有

$$
\sigma(\omega+\mathrm{i}0^+) = \frac{-4e^2t^2}{\mathrm{i}\omega}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\varepsilon D(\varepsilon)\int\mathrm{d}\nu\mathrm{d}\nu' A(\varepsilon,\nu)A(\varepsilon,\nu')\frac{n_{\mathrm{F}}(\nu)-n_{\mathrm{F}}(\nu')}{\nu+\omega-\nu'+\mathrm{i}0^+}
$$

再利用

$$
\frac{1}{\nu-\nu'+\omega+\mathrm{i}0^+} = P\frac{1}{\nu-\nu'+\omega}-\mathrm{i}\pi\delta(\nu-\nu'+\omega)
$$

取实部, 对 ν' 积分, 得

$$\mathrm{Re}\sigma(\omega+\mathrm{i}0^+)=4\pi e^2t^2\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\varepsilon\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\nu D(\varepsilon)A(\varepsilon,\nu)A(\varepsilon,\nu+\omega)\frac{n_\mathrm{F}(\nu)-n_\mathrm{F}(\nu+\omega)}{\omega} \tag{9.4.4}$$

根据量纲补上缺失的常量, 得

$$\mathrm{Re}\sigma(\omega+\mathrm{i}0^+)=\frac{4\pi e^2t^2a^2}{\hbar^2\varOmega}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\varepsilon\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\nu D(\varepsilon)A(\varepsilon,\nu)A(\varepsilon,\nu+\omega)\frac{n_\mathrm{F}(\nu)-n_\mathrm{F}(\nu+\omega)}{\omega} \tag{9.4.5}$$

其中, $\varOmega$ 是元胞体积; a 是格点间距 (它们原先被取值为 1 了).

类似地, 我们还可以计算其他一些响应函数.

三、DMFT 的计算流程

在 DMFT 的实际应用中, 一般可以运用如下程序来计算:

(1) 从杂质自能函数 $\varSigma_{\mathrm{imp}}(\mathrm{i}\omega_n)$ 的一个初始猜测开始.

(2) 用自洽条件来从杂质自能导出原点阵模型中的在位格林函数 g_{loc}.

例如, 多数情形下有

$$g_{\mathrm{loc}}=\sum_k\frac{1}{\mathrm{i}\omega_n+\mu-\varepsilon_k-\varSigma_{\mathrm{imp}}(\mathrm{i}\omega_n)}$$

这时可进一步借助于态密度将求和转变为积分.

(3) 由公式 $\varUpsilon_0^{-1}(\mathrm{i}\omega_n)=g_{\mathrm{loc}}^{-1}(\mathrm{i}\omega_n)+\varSigma_{\mathrm{imp}}(\mathrm{i}\omega_n)$ 来得到 Weiss 函数.

(4) 用杂质模型的某个近似算法 (solver) 来计算杂质格林函数 g_{imp}.

(5) 从 $\varSigma_{\mathrm{imp}}^{(\mathrm{new})}(\mathrm{i}\omega_n)=\varUpsilon_0^{-1}(\mathrm{i}\omega_n)-g_{\mathrm{imp}}^{-1}(i\omega_n)$ 计算出新的杂质自能.

(6) 程序不断迭代直到收敛.

第五节　应用举例: t-J 模型的扩展 DMFT

t-J 模型可作为单带 Hubbard 模型的强关联极限而导出. 自从高温超导体发现以来, 它成了高温超导研究中的常用理论. 空穴掺杂 Mott-Hubbard 绝缘体物理的标准模型也是 t-J 模型. 我们这里不去讨论 t-J 模型所蕴含的丰富的物理, 而是利用该模型作为例子来介绍如何利用和发展 DMFT 的思想和方法.

一、DMFT 自洽方程组的导出

仍然用空腔法来推导出 t-J 模型的 DMFT 自洽方程组.

考虑如下的 t-J 模型的哈密顿:

$$\hat{H}=-\sum_{i,j}t_{ij}\tilde{c}_{i\sigma}^{+}\tilde{c}_{j\sigma}+\frac{1}{2}\sum_{i,j}J_{ij}\underline{\hat{S}}_i\cdot\underline{\hat{S}}_j \tag{9.5.1}$$

其中

$$t_{ij}=\begin{cases} t & (\text{若 } i,j \text{ 是最近邻格位}) \\ 0 & (\text{其他情形}) \end{cases} \tag{9.5.2}$$

$$J_{ij}=\begin{cases} J, & (\text{若 } i,j \text{ 是最近邻格位}) \\ 0 & (\text{其他情形}) \end{cases} \tag{9.5.3}$$

且

$$\tilde{c}_{i\sigma}^{+}=\hat{c}_{i\sigma}^{+}(1-\hat{n}_{i,\bar{\sigma}}) \tag{9.5.4}$$

$\hat{n}_{i,\bar{\sigma}}$ 是格位 i 上自旋为 $\bar{\sigma}\equiv-\sigma$ 的粒子数密度. $\hat{S}_i$ 是格位 i 上的自旋算符. 由式 (9.5.4) 可以看出, 由两个自旋分别为 ↑ 和 ↓ 的电子占据同一格位将被避免.

为了处理这种无双占有的约束, 我们关心的算符可通过给哈密顿加上一个局域库仑排斥项, 同时将 $\tilde{c}$ 换成满足通常的正则反对易关系的 $\hat{c}$, 最后再把库仑势取极限 $U\to\infty$ 即可. 这样就得到等效的**拓广 Hubbard 模型**:

$$\hat{H}=-\sum_{ij,\sigma}t_{ij}\hat{c}_{i\sigma}^{+}\hat{c}_{j\sigma}+U\sum_{i}\hat{n}_{i\uparrow}\hat{n}_{i\downarrow}+\frac{1}{2}\sum_{i,j}J_{ij}\underline{\hat{S}}_i\cdot\underline{\hat{S}}_j \tag{9.5.5}$$

相应的作用量为

$$\begin{aligned} S=\int_0^{\beta}\mathrm{d}\tau\Bigg\{&\sum_{ij,\sigma}c_{i\sigma}^{+}(\tau)\left[\left(\frac{\partial}{\partial\tau}-\mu\right)\delta_{ij}-t_{ij}\right]c_{j\sigma}(\tau) \\ &+U\sum_{i}n_{i\uparrow}(\tau)n_{i\downarrow}(\tau)+\frac{1}{2}\sum_{i,j}J_{ij}\underline{S}_i(\tau)\cdot\underline{S}_j(\tau)\Bigg\} \end{aligned} \tag{9.5.6}$$

选定一个参考格位 O(常称为杂质格位), 该作用量可分为如下三部分:

(1) 对所选格位 O 的在位部分 S_0:

$$S_0=\int_0^{\beta}\mathrm{d}\tau\left[\sum_{\sigma}c_{0\sigma}^{+}(\tau)\left(\frac{\partial}{\partial\tau}-\mu\right)c_{0\sigma}+Un_{0\uparrow}(\tau)n_{0\downarrow}(\tau)\right] \tag{9.5.7}$$

(2) 所选格位 O 与体系其余部分之间的相互作用 ΔS:

$$\Delta S=\int_0^{\beta}\mathrm{d}\tau\left\{\sum_{i}\left[-t_{0i}c_{i\sigma}^{+}(\tau)c_{0\sigma}(\tau)-t_{0i}c_{0\sigma}^{+}(\tau)c_{i\sigma}(\tau)+\frac{1}{2}(J_{i0}+J_{0i})\underline{S}_i(\tau)\cdot\underline{S}_0(\tau)\right]\right\} \tag{9.5.8}$$

(3) 有空腔存在时的点阵哈密顿 S_{cavi}, 它同于式 (9.5.6) 中的哈密顿, 但其中 i,j 都不能取格位 O.

由于自旋算符 $\hat{\underline{S}}_i$ 也能借助于 $\hat{c}^+_{i\sigma}, \hat{c}_{i\sigma}$ 来表达 (见式 (1.4.59)), 故配分函数 Z 可表达为 (参见式 (7.3.22) 和式 (7.3.35))

$$
\begin{aligned}
Z &= \int \mathfrak{D}[c^+_{0\sigma}c_{0\sigma}] \int \prod_{i\neq 0} \mathfrak{D}[c^+_{i\sigma}c_{i\sigma}] \mathrm{e}^{-S_0 - S_{\text{cavi}} - \Delta S} \\
&= \int \mathfrak{D}[c^+_{0\sigma}c_{0\sigma}] \mathrm{e}^{-S_0} Z_{\text{cavi}} \langle \mathrm{e}^{-\Delta S} \rangle_{\text{cavi}}
\end{aligned} \tag{9.5.9}
$$

其中, $\langle \cdots \rangle_{\text{cavi}}$ 代表对空腔作用量 S_{cavi} 来求平均. 若令 $\Delta S = \int_0^\beta \mathrm{d}\tau \Delta\mathfrak{L}(\tau)$, 则 Z 可以写成如下展开形式:

$$
\begin{aligned}
Z = \int \mathfrak{D}[c^+_{0\sigma}c_{0\sigma}] \mathrm{e}^{-S_0} Z_{\text{cavi}} \Big[& 1 - \int_0^\beta \mathrm{d}\tau \langle \Delta\mathfrak{L}(\tau) \rangle_{\text{cavi}} \\
& + \frac{1}{2!} \int_0^\beta \mathrm{d}\tau_1 \int_0^\beta \mathrm{d}\tau_2 \langle T_\tau \Delta\hat{\mathfrak{L}}(\tau_1) \Delta\hat{\mathfrak{L}}(\tau_2) \rangle_{\text{cavi}} + \cdots \Big]
\end{aligned} \tag{9.5.10}
$$

假设体系没有长程序, 此时 $\langle \underline{S}_i(\tau) \rangle = 0$, 则式 (9.5.10) 右端括号中 $\Delta\mathfrak{L}$ 的线性项将会为零. (即使体系处于破缺对称相, 此时若将原来的自旋算符作如下的代换: $\underline{S}_i \to \underline{S}_i - \langle \underline{S}_i \rangle$, 则我们的处理方法照样可以用.) 式 (9.5.10) 中剩下的领头阶项即为

$$
\begin{aligned}
& \frac{1}{2!} \int_0^\beta \mathrm{d}\tau_1 \int_0^\beta \mathrm{d}\tau_2 \Big\langle T_\tau \Big[\sum_{i\sigma} -t_{i0} \hat{c}^+_{i\sigma}(\tau_1) \hat{c}_{0\sigma}(\tau_1) - t_{0i} \hat{c}^+_{0\sigma}(\tau_1) \hat{c}_{i\sigma}(\tau_1) \\
& + \sum_i J_{i0} \hat{\underline{S}}_i(\tau_1) \cdot \hat{\underline{S}}_0(\tau_1) \Big] \Big[\sum_{j\sigma} -t_{j0} \hat{c}^+_{j\sigma}(\tau_2) \hat{c}_{0\sigma}(\tau_2) - t_{0j} \hat{c}^+_{0\sigma}(\tau_2) \hat{c}_{j\sigma}(\tau_2) \\
& + \sum_j J_{0j} \hat{\underline{S}}_j(\tau_2) \cdot \hat{\underline{S}}_0(\tau_2) \Big] \Big\rangle_{\text{cavi}}
\end{aligned} \tag{9.5.11}
$$

注意到, 由于 $\langle \hat{c}_{i\sigma}(\tau_1) \hat{\underline{S}}_j(\tau_2) \rangle_{\text{cavi}} = 0$, 所以式 (9.5.11) 中反映动能项与自旋项之间的干涉效应的交叉项为零. 这样有效作用量可以写成

$$
\begin{aligned}
S_{\text{eff}} = & S_0 - \int_0^\beta \mathrm{d}\tau_1 \mathrm{d}\tau_2 \Big[c^+_{0\sigma}(\tau_1) \sum_{ij} t_{i0} t_{0j} \langle T_\tau \hat{c}_{i\sigma}(\tau_1) \hat{c}_{j\sigma}(\tau_2) \rangle_{\text{cavi}} c_{0\sigma}(\tau_2) \\
& + \underline{S}_0(\tau_1) \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{i0} J_{0j} \langle T_\tau \hat{\underline{S}}_i(\tau_1) \cdot \hat{\underline{S}}_j(\tau_2) \rangle_{\text{cavi}} \underline{S}_0(\tau_2) \Big]
\end{aligned} \tag{9.5.12}
$$

由此可得 (参见式 (9.2.12) 及式 (9.2.14))

$$
S_{\text{eff}} = - \int_0^\beta \mathrm{d}\tau_1 \mathrm{d}\tau_2 c^+_{0\sigma}(\tau_1) \varUpsilon_0^{-1}(\tau_1 - \tau_2) c_{0\sigma}(\tau_2)
$$

$$-\frac{1}{2}\int_0^\beta \mathrm{d}\tau_1\mathrm{d}\tau_2\underline{S}_0(\tau_1)\chi_0^{-1}(\tau_1-\tau_2)\underline{S}_0(\tau_2)+\int_0^\beta \mathrm{d}\tau U n_{0\uparrow}(\tau)n_{0\downarrow}(\tau) \quad (9.5.13)$$

其中 (参见式 (9.2.14))

$$\varUpsilon_0^{-1}(\mathrm{i}\omega_n)=\mathrm{i}\omega_n+\mu-\sum_{ij}t_{0i}t_{0j}g_{ij}^{\mathrm{cavi}}(\mathrm{i}\omega_n) \quad (9.5.14)$$

$$\chi_0^{-1}(\mathrm{i}\omega_n)=\sum_{ij}J_{i0}J_{0j}\chi_{ij}^{\mathrm{cavi}}(\mathrm{i}\omega_n) \quad (9.5.15)$$

同样 (参见式 (9.2.16)) 还有

$$g_{ij}^{\mathrm{cavi}}=g_{ij}-g_{i0}g_{00}^{-1}g_{0j} \quad (9.5.16)$$

$$\chi_{ij}^{\mathrm{cavi}}=\chi_{ij}-\chi_{i0}\chi_{00}^{-1}\chi_{0j} \quad (9.5.17)$$

在 $d\to\infty$ 极限下 (参见式 (9.3.18)), **原点阵的**格林函数为

$$g(\underline{k},\mathrm{i}\omega_n)=\frac{1}{\mathrm{i}\omega_n+\mu-\varepsilon_{\underline{k}}-\varSigma(\mathrm{i}\omega_n)} \quad (9.5.18)$$

同样可推知自旋磁化率为

$$\chi(\underline{q},\mathrm{i}\omega_n)\equiv\int_0^\beta \mathrm{d}\tau \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n\tau}\langle T_\tau\hat{S}_{-\underline{q},\alpha}(\tau)\hat{S}_{\underline{q},\alpha}(0)\rangle=\frac{1}{J_{\underline{q}}+M(\mathrm{i}\omega_n)} \quad (9.5.19)$$

其中, $\varepsilon_{\underline{k}}$ 和 $J_{\underline{q}}$ 分别为迁徙振幅 t_{ij} 和交换耦合 J_{ij} 的傅里叶变换; $\varSigma(\mathrm{i}\omega_n)$ 和 $M(\mathrm{i}\omega_n)$ 分别为原点阵的单粒子自能和两粒子自能. 利用以上关系式, 最终可得到如下**自洽条件**(参见式 (9.2.27)):

$$\varUpsilon_0^{-1}(\mathrm{i}\omega_n)=\varSigma(\mathrm{i}\omega_n)+g_{\mathrm{loc}}^{-1}(\mathrm{i}\omega_n) \quad (9.5.20)$$

$$\chi_0^{-1}(\mathrm{i}\omega_n)=M(\mathrm{i}\omega_n)-\chi_{\mathrm{loc}}^{-1}(\mathrm{i}\omega_n) \quad (9.5.21)$$

其中

$$g_{\mathrm{loc}}(\mathrm{i}\omega_n)=\sum_{\underline{k}}g(\underline{k},\mathrm{i}\omega_n) \quad (9.5.22)$$

$$\chi_{\mathrm{loc}}(\mathrm{i}\omega_n)=\sum_{\underline{q}}\chi(\underline{q},\mathrm{i}\omega_n) \quad (9.5.23)$$

尽管这些关系把 Weiss 场与局域量 (这些量可由局域有效作用量 (9.5.13) 计算出) 相联系, 从而构成封闭的方程组, 但对实际计算, 更为方便的是建立起局域有效作用量的哈密顿表示. Weiss 场 Υ_0^{-1} 的单粒子性质可用费米浴表示而有玻色特性的两粒子场 χ_0^{-1} 可用玻色浴表示. 哈密顿表示的一种可能的选择是

$$\begin{aligned}\hat{H} =& \sum_{\underline{k}\sigma} \varepsilon_{\underline{k}} \hat{c}^+_{\underline{k}\sigma} \hat{c}_{\underline{k}\sigma} + V \sum_{\underline{k}\sigma} \left(\hat{c}^+_{\underline{k}\sigma} \hat{c}_{0\sigma} + \text{h.c.} \right) - \sum_{\sigma} \mu \hat{c}^+_{0\sigma} \hat{c}_{0\sigma} \\ &+ U \hat{n}_{0\uparrow} \hat{n}_{0\downarrow} + \sum_{\underline{q}} \omega_{\underline{q}} \hat{\underline{h}}^+_{\underline{q}} \cdot \hat{\underline{h}}_{\underline{q}} + I \sum_{\underline{q}} \hat{\underline{S}}_0 \cdot \left(\hat{\underline{h}}_{\underline{q}} + \hat{\underline{h}}^+_{-\underline{q}} \right)\end{aligned} \tag{9.5.24}$$

其中, $\hat{\underline{h}}_{\underline{q}}$ 对应于有对易关系 $[\hat{h}^{\alpha}_{\underline{q}}, \hat{h}^{\beta+}_{\underline{q}'}] = \delta_{\underline{qq}'} \delta_{\alpha\beta}$ 的矢量玻色浴 (α, β 是矢量的分量指标). 和哈密顿相应的作用量为

$$\begin{aligned}S =& S_0 + \int_0^{\beta} \mathrm{d}\tau \sum_{\underline{k}\sigma} \left\{ c^+_{\underline{k}\sigma}(\tau) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \varepsilon_{\underline{k}} \right) c_{\underline{k}\sigma}(\tau) + \left[V c^+_{\underline{k}\sigma}(\tau) c_{0\sigma}(\tau) + \text{h.c.} \right] \right\} \\ &+ \int_0^{\beta} \mathrm{d}\tau \sum_{\underline{q}} \left[\underline{h}^+_{\underline{q}}(\tau) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \omega_{\underline{q}} \right) \underline{h}_{\underline{q}}(\tau) + I \underline{h}_{\underline{q}}(\tau) \cdot \underline{S}_0(\tau) + I \underline{S}_0(\tau) \cdot \underline{h}^+_{-\underline{q}}(\tau) \right]\end{aligned} \tag{9.5.25}$$

由于该作用量对于 $c_{\underline{k}\sigma}(\tau)$ 和 $\underline{h}_{\underline{q}}(\tau)$ 都是二次式, 故都能积分出来. 利用附录 7A 中的公式可得

$$\begin{aligned}S =& S_0 - \int_0^{\beta} \mathrm{d}\tau_1 \mathrm{d}\tau_2 \sum_{\sigma} c^+_{0\sigma}(\tau_1) \left[\sum_{\underline{k}} V^2 \frac{\delta(\tau_1 - \tau_2)}{\partial_{\tau_1} + \varepsilon_{\underline{k}}} \right] c_{0\sigma}(\tau_2) \\ &- \int_0^{\beta} \mathrm{d}\tau_1 \mathrm{d}\tau_2 \underline{S}_0(\tau_1) \left[\sum_{\underline{q}} I^2 \frac{\delta(\tau_1 - \tau_2)}{\partial_{\tau_1} + \omega_{\underline{q}}} \right] \underline{S}_0(\tau_2)\end{aligned} \tag{9.5.26}$$

只要令

$$\Upsilon_0^{-1}(\tau_1 - \tau_2) = -\left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \mu \right) \delta_{\tau_1 \tau_2} + \sum_{\underline{k}} V^2 \frac{\delta(\tau_1 - \tau_2)}{\partial_{\tau_1} + \varepsilon_{\underline{k}}} \tag{9.5.27}$$

$$\chi_0^{-1}(\tau_1 - \tau_2) = \sum_{\underline{q}} I^2 \left[\frac{\delta(\tau_1 - \tau_2)}{-\partial_{\tau_2} + \omega_{\underline{q}}} + \frac{\delta(\tau_1 - \tau_2)}{\partial_{\tau_2} + \omega_{\underline{q}}} \right] \tag{9.5.28}$$

则该作用量 S 就等价于有效作用量 S_{eff}. 式 (9.5.27) 和式 (9.5.28) 的傅里叶变换为

$$\Upsilon_0^{-1}(\mathrm{i}\omega_n) = \mathrm{i}\omega_n + \mu - V^2 g_{\text{c}}(\mathrm{i}\omega_n) \tag{9.5.29}$$

$$\chi_0^{-1}(\mathrm{i}\omega_n) = -I^2 g_{\text{h}}(\mathrm{i}\omega_n) \tag{9.5.30}$$

其中

$$g_{\mathrm{c}}(\mathrm{i}\omega_n) = \sum_{\underline{k}} \frac{1}{\mathrm{i}\omega_n - \varepsilon_{\underline{k}}} \tag{9.5.31}$$

$$g_{\mathrm{h}}(\mathrm{i}\omega_n) = \sum_{\underline{q}} \frac{2\omega_{\underline{q}}}{(\mathrm{i}\omega_{\underline{q}})^2 - \omega_{\underline{q}}^2} \tag{9.5.32}$$

由式 (9.5.29) 和式 (9.5.30) 以及式 (9.5.20) 和式 (9.5.21) 可得

$$g_{\mathrm{loc}}^{-1}(\mathrm{i}\omega_n) = \mathrm{i}\omega_n + \mu - \Sigma(\mathrm{i}\omega_n) - V^2 g_{\mathrm{c}}(\mathrm{i}\omega_n) \tag{9.5.33}$$

$$\chi_{\mathrm{loc}}^{-1}(\mathrm{i}\omega_n) = M(\mathrm{i}\omega_n) + I^2 g_{\mathrm{h}}(\mathrm{i}\omega_n) \tag{9.5.34}$$

现在我们把式 (9.5.24) 写成更熟悉的形式. 令 $\hat{d}_\sigma = \hat{c}_{0\sigma}$, $\hat{d}_\sigma^+ = \hat{c}_{0\sigma}^+$, 即将所选参考格位上的电子视为杂质电子, 且将杂质电子自旋表示为

$$\underline{\hat{S}}_d \equiv \underline{\hat{S}}_0 = \frac{1}{2}\sum_{s,s'} \hat{d}_s^+ \underline{\sigma}_{ss'} \hat{d}_{s'}$$

则我们原始的点阵模型被映射成如下有费米浴和玻色浴的推广的量子单杂质模型：

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{\underline{k}\sigma} \varepsilon_{\underline{k}} \hat{c}_{\underline{k}\sigma}^+ \hat{c}_{\underline{k}\sigma} + V \sum_{\underline{k}\sigma} \left(\hat{c}_{\underline{k}\sigma}^+ \hat{d}_\sigma + \mathrm{h.c.} \right) - \mu \hat{n}_d + U \hat{n}_{d\uparrow} \hat{n}_{d\downarrow} \\ & + \sum_{\underline{q}} \omega_{\underline{q}} \hat{\underline{h}}_{\underline{q}}^+ \cdot \hat{\underline{h}}_{\underline{q}} + \frac{I}{2} \sum_{\underline{q}ss'} \hat{d}_s^+ \hat{\underline{\sigma}}_{ss'} \cdot \left(\hat{\underline{h}}_{\underline{q}} + \hat{\underline{h}}_{-\underline{q}}^+ \right) \hat{d}_{s'} \end{aligned} \tag{9.5.35}$$

显然, 自洽性要求杂质模型的单粒子格林函数 g_d 和自旋磁化率 χ_d 应该分别等于原始点阵模型的局域格林函数 g_{loc} 和局域自旋磁化率 χ_{loc}：

$$g_d(\mathrm{i}\omega_n) = g_{\mathrm{loc}}(\mathrm{i}\omega_n), \quad \chi_d(\mathrm{i}\omega_n) = \chi_{\mathrm{loc}}(\mathrm{i}\omega_n) \tag{9.5.36}$$

二、非交叉近似

我们在非交叉近似下求解自洽方程组. 将杂质电子算符用赝费米子算符和隶玻色子算符表示出来 (参见式 (9.2.6)), 即 $\hat{d}_\sigma^+ = \hat{f}_\sigma^+ \hat{b}$, 并利用 $\sum\limits_\sigma \hat{f}_\sigma^+ \hat{f}_\sigma + \hat{b}^+ \hat{b} = 1$ 以及由于无双占有态 (考虑 $U \to \infty$ 情形), 使得 $\sum\limits_{s''} \hat{f}_s^+ \hat{f}_{s''}^+ \hat{f}_{s'} \hat{f}_{s''}$ 的贡献为零, 故可略去. 从而可进一步将玻色浴与 $\underline{\hat{S}}_d$ 的杂化项化为

$$\frac{I}{2} \sum_{\underline{q}ss'} \hat{\underline{\sigma}}_{ss'} \cdot \left(\hat{\underline{h}}_{\underline{q}} + \hat{\underline{h}}_{-\underline{q}}^+ \right) \hat{f}_s^+ \hat{f}_{s'} \tag{9.5.37}$$

这样可以在裸耦合常数 V 和 I 的自洽微扰论中, 给出 Luttinger-Ward 生成泛函 $\varPhi$ 的如下最低阶贡献图, 如图 9.5.1 所示.

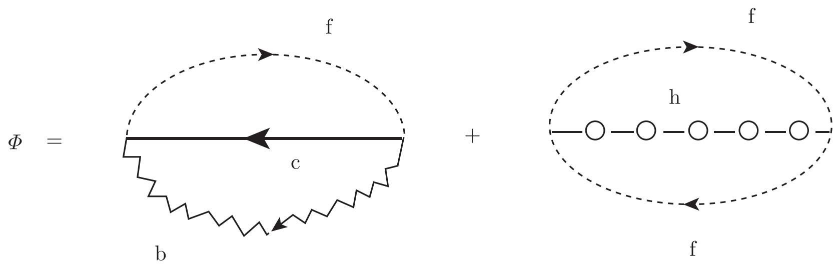


图 9.5.1　Φ 的最低图

图 9.5.1 中, Φ 的第一个图与前面所讨论的非简并 Anderson 杂质模型的图形相同, 第二图形中, -○-○-○- 代表玻色浴的 $g_{\rm h}$. 通过截断图形中的一根线可得到相应的自能图, 如图 9.5.2 所示.

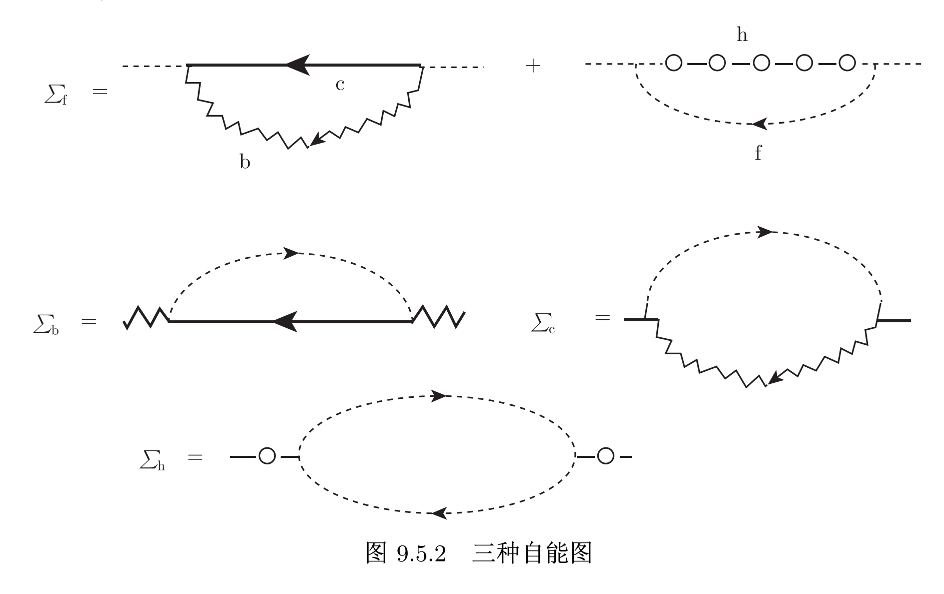


图 9.5.2　三种自能图

这些图中, $\Sigma_{\rm b}$ 和 $\Sigma_{\rm c}$ 的图与非简并 Anderson 杂质模型的图形中对应图完全相同, $\Sigma_{\rm f}$ 的两个图形中的第一个图 (称为 $\Sigma_{\rm f}^{(1)}$) 也与前面对应的图相同. 所不同的新图有 $\Sigma_{\rm f}$ 的第二个图 (称为 $\Sigma_{\rm f}^{(2)}$) 和 $\Sigma_{\rm h}$ 的图形. 所以我们只需计算这两个新图的贡献, 其余旧图贡献的表达式与以前对应的部分是相同的.

$$\Sigma_{{\rm f}\sigma}^{(2)}({\rm i}\omega_n) = -\frac{I^2}{4\beta}\sum_{ss'}\sigma_{ss'}^{\alpha}\sigma_{s's}^{\alpha}\sum_{n'} g_{{\rm h}\alpha}({\rm i}\Omega_n)g_{{\rm f}s'}({\rm i}\omega_n + {\rm i}\Omega_{n'}) \tag{9.5.38}$$

$$\Sigma_{{\rm h}\alpha}({\rm i}\Omega_n) = \frac{I^2}{4\beta}\sum_{ss'}\sigma_{ss'}^{\alpha}\sigma_{s's}^{\alpha}\sum_{n'} g_{{\rm f}s}({\rm i}\omega_{n'})g_{{\rm f}s'}({\rm i}\omega_{n'} + {\rm i}\Omega_n) \tag{9.5.39}$$

其中, α 代表矢量的分量指标. 式 (9.5.39) 中右端与式 (9.5.38) 相差一个负号是考

虑了有一个赝费米子圈所提供的负号. 在解析延拓、投影并取 $\lambda \to \infty$ 后, 有

$$\Sigma_{\mathrm{f}\sigma}^{(2)}(\omega + \mathrm{i}0^+) = -\frac{I^2}{4}\sum_{ss'}\sigma_{ss'}^{\alpha}\sigma_{s's}^{\alpha}\int \mathrm{d}\xi n_{\mathrm{B}}(\xi) D_{\mathrm{h}\alpha}(\xi) g_{\mathrm{f}s'}(\omega + \xi + \mathrm{i}0^+) \tag{9.5.40}$$

其中, $n_{\mathrm{B}}(\xi)$ 是玻色分布函数; $D_{\mathrm{h}\alpha}(\xi) = -\mathrm{Im} g_{\mathrm{h}\alpha}(\omega + \mathrm{i}0^+)/\pi$ 是玻色浴的谱密度函数.

$$\begin{aligned}\Sigma_{\mathrm{h}\alpha}(\Omega + \mathrm{i}0^+, \lambda \to \infty) = &\frac{I^2}{4}\mathrm{e}^{-\beta\lambda}\sum_{ss'}\sigma_{ss'}^{\alpha}\sigma_{s's}^{\alpha}\int \mathrm{d}\xi \mathrm{e}^{-\beta\xi} \\ &\cdot [A_{\mathrm{f}s}(\xi) g_{\mathrm{f}s'}(\xi + \Omega + \mathrm{i}0^+) + A_{\mathrm{f}s'}(\xi) g_{\mathrm{f}\sigma}(\xi - \Omega - \mathrm{i}0^+)]\end{aligned} \tag{9.5.41}$$

注意到, 和关系式 (9.2.44) 类似, 有杂质自旋磁化率的如下关系式:

$$\chi_{d\alpha}(\Omega) = -\frac{1}{I^2}\lim \mathrm{e}^{\beta\lambda}\Sigma_{\mathrm{h}\alpha}(\Omega, \lambda) \tag{9.5.42}$$

这样可得

$$\mathrm{Im}\chi_{d\alpha}(\Omega + \mathrm{i}0^+) = \frac{\pi}{4n_{\mathrm{B}}(\Omega)}\sum_{ss'}\sigma_{ss'}^{\alpha}\sigma_{s's}^{\alpha}\int \mathrm{d}\xi \mathrm{e}^{-\beta\xi} A_{\mathrm{f}s}(\xi - \Omega) A_{fs'}(\xi) \tag{9.5.43}$$

自此非交叉近似下的方程组就封闭了. 它们只需要自洽地求解即可.

三、求自洽解的迭代步骤

这里给出可实际执行的求自洽解的迭代方案中的一种. 首先注意到由式 (9.5.18)、式 (9.5.22) 及式 (9.5.33) 可得

$$g_{\mathrm{loc}} = \sum_{\underline{k}}\frac{1}{g_{\mathrm{loc}}^{-1} + V^2 g_{\mathrm{c}} - \varepsilon_{\underline{k}}} \tag{9.5.44}$$

由式 (9.5.19)、式 (9.5.23) 及式 (9.5.34) 可得

$$\chi_{\mathrm{loc}} = \sum_{\underline{q}}\frac{1}{\chi_{\mathrm{loc}}^{-1} - I^2 g_{\mathrm{h}} + J_{\underline{q}}} \tag{9.5.45}$$

这样:

(1) 首先分别给出费米浴、玻色浴、赝费米子和隶玻色子的谱密度函数 $A_{\mathrm{c}}(\xi)$、$D_{\mathrm{h}}(\xi)$、$A_{\mathrm{f}}(\xi)$ 和 $A_{\mathrm{b}}(\xi)$ 的初始值.

(2) 由此确定杂质格林函数 $g_d(g_{\mathrm{loc}})$、$\chi_d(\chi_{\mathrm{loc}})$ 及赝粒子格林函数作为第一次近似.

(3) 再利用本节中上一小节里的公式以及本章第二节中的公式 (杂质解算器) 确定新的 $g_{\mathrm{loc}}, \chi_{\mathrm{loc}}$ 和 $g_{\mathrm{f}}, g_{\mathrm{b}}$, 进而得到新的 A_{f} 和 A_{b}.

(4) 利用恒等式 (9.5.44) 和式 (9.5.45) 来确定 V^2g_c 和 I^2g_h, 从而得到新的 A_c 和 D_h.

(5) 由这些新的谱密度函数进行新的迭代, 直到满足收敛性要求.

这里我们不再给出有关的具体的数值计算结果.

第六节　用 DMFT 作电子结构计算

一、LDA 下的密度泛函理论

材料的电子性质的计算是固体物理的一个重要任务. 它的一个标准途径是局域密度近似(**LDA**) 下的密度泛函理论(**DFT**). 这个途径将电子之间的两两相互作用的库仑作用用一个局域的 LDA 势 $V_\mathrm{LDA}(\rho(\underset{\sim}{x}_i))$ 代替, 其中, $\rho(\underset{\sim}{x}_i)$ 是位置在 $\underset{\sim}{x}_i$ 处的电子所看到的其他电子的时间平均的局域密度. 因而它把一个多体问题简化成了一个在局域势中的单电子问题. 这个途径在研究许多材料性质时获得了很大成功, 包括计算基态能量和能带结构等, 但它却蕴含了一个基本缺陷, 即它仅十分初步地考虑了电子的关联, 而一旦在电子关联较强时就失效. 例如, 在过渡金属及其氧化物, f 电子体系中, 价电子部分地占有 d 轨道或 f 轨道, 在同一格位上, 处于这些轨道的两个电子之间的距离就特别短, 因而电子关联很强, 多体效应显著, 从而导致 LDA 失效. 例如, LDA 预言 NiO 和 La_2CuO_4 等在反铁磁序温度之上时是金属而实际上这些材料是绝缘体. 以 Mott 绝缘体为例, 由于 d 轨道仅部分被填充, 所以 LDA 能带结构作出金属行为的预言. 但实际上在位库仑排斥能 U 将金属 LDA 能带分裂成两个 Hubbard 带, 分别称为上、下 Hubbard 带. 如果每个格位的平均电子数是 1, 则只有下带被填充而上带完全空着. 所有这些物理行为在 LDA 中都被忽略了. 克服这种缺陷的一种方法是 LDA+U 方法 (参见 Anisimov V I, Zaanen J, Andersen O K. Phys. Rev., 1991, B44: 943), 但这种方法自动地给出有分离 Hubbard 带的局域电子. 此外, 无论是 LDA+U 还是 LDA 都不能给出许多过渡金属氧化物和重费米子体系所具有的强关联金属相. 这种强关联金属相可以出现在 U 的中间值上, 也可以通过对 Mott 绝缘体掺杂而得到. 这种强关联金属也有 Hubbard 带, 但上下带之间可以有准粒子峰, 其低能行为由准粒子物理所支配. 这些准粒子有大的有效质量并且随 U 的增加而增大, 而准粒子峰则随 U 的增加而减弱, 直到发生 Mott-Hubbard 转变而成为绝缘体.

前面所介绍的 DMFT 能够描述所有这些多体效应, 能用统一的框架来描述弱关联 (正如 LDA 那样)、强关联金属以及 Mott 绝缘体. 图 9.6.1 表明了各种途径对 U 的适用范围. 其中, W 为 LDA 带宽, 对于 LDA, $U \ll W$; 对于 LDA+U, $U \gg W$.

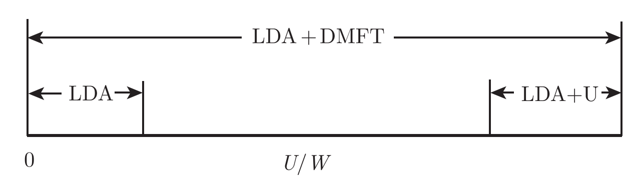


图 9.6.1　三种方法的适用范围

为了说明 LDA+DMFT 的方法, 我们首先简单回顾一下 DFT/LDA 的要点, 其细节可参见文献 (Driezler R M, Gross E K U. Density Functional Theory. Berlin: Spinger, 1990).

DFT 是建立在 Hohenberg-Kohn(HK) 定理基础之上的. 在其原初形式中, HK 定理应用于无自旋费米子体系的基态. 后来其他作者将其观点推广到包括自旋、有限温度以及 (在某种程度上) 激发态情形; 但这里我们不讨论这些推广的 HK 定理, 不过所有这些推广的基本特征在基态情形已很明显. 在该途径中, 将体系的粒子数密度 $\rho(\underline{x})$ 作为描述体系基态所有物理性能的基本变量.

设 $V(\underline{x})$ 是单个电子的局域外势, $V(\underline{x}) \equiv \sum_i v(\underline{x} - \underline{R}_i)$, 它反映晶格周期势场的效应. 第一 HK 定理指出: 局域外势由体系基态中的电子密度 $\rho(\underline{x})$(除一个可加常数外) 唯一地确定. 换句话说, 局域外势仅是基态密度的泛函. 第二 HK 定理指出: 仅当密度 $\rho(\underline{x})$(它满足归一化条件) 取严格的基态密度时, 能量泛函将取极小值, 而这正代表了体系的基态能量.

$\rho(\underline{x})$ 的归一化条件是 $N = \int \mathrm{d}^3x\rho(\underline{x})$, 其中, N 是体系的粒子数. 体系的能量泛函可以表达成如下形式:

$$E[\rho, V] = E^0_{\mathrm{kin}}[\rho] + E_{\mathrm{Hartree}}[\rho] + E_{\mathrm{xc}}[\rho] + \int \mathrm{d}^3xV(\underline{x})\rho(\underline{x}) \tag{9.6.1}$$

式中, $E^0_{\mathrm{kin}}[\rho]$ 是对应于无相互作用电子体系的动能. $E_{\mathrm{Hartree}}[\rho]$ 对应 Hartree 能量:

$$E_{\mathrm{Hartree}}[\rho] = \frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3x\mathrm{d}^3x'\rho(\underline{x})V_{\mathrm{ee}}(\underline{x} - \underline{x}')\rho(\underline{x}') \tag{9.6.2}$$

其中, V_{ee} 是电子之间的库仑作用. $E_{\mathrm{xc}}[\rho]$ 是未知的交换关联能:

$$E_{\mathrm{xc}}[\rho] = \left(E_{\mathrm{kin}}[\rho] - E^0_{\mathrm{kin}}[\rho]\right) + (V_{\mathrm{ee}}[\rho] - E_{\mathrm{Hartree}}[\rho]) \tag{9.6.3}$$

其中, $E_{\mathrm{kin}}[\rho]$ 对应相互作用电子体系的动能. 由式 (9.6.3) 可以看出, 超出 Hartree 近似的全部多体效应已包括到交换关联能泛函 $E_{\mathrm{xc}}[\rho]$ 之中了. 尽管它是未知的, 但人们已证明 (参见 Jones R O, Gunnarsson O. Rev. Mod. Phys., 1989, 61: 689), 泛函 $E_{\mathrm{xc}}[\rho]$ 不依赖于所研究的材料, 即与 $V(\underline{x})$ 无关.

可以把 $E[\rho,V]$ 对 ρ 求极小值替换成对一组单粒子波函数 φ_i 求极小值, 其中

$$\rho(\underline{x})=\sum_{i=1}^{N}|\varphi_i(\underline{x})|^2 \tag{9.6.4}$$

引入拉格朗日乘子 ε_i 来保证波函数 φ_i 的归一化条件, 使得由

$$\frac{\delta}{\delta\varphi_i}\left\{E[\rho,V]+\varepsilon_i\left[1-\int \mathrm{d}^3x|\varphi_i(\underline{x})|^2\right]\right\}=0$$

给出 **Kohn-Sham(KS) 方程**:

$$\left[-\frac{\boldsymbol{\nabla}^2}{2m_\mathrm{e}}+V(\underline{x})+\int \mathrm{d}^3x' V_\mathrm{ee}(\underline{x}-\underline{x}')\rho(\underline{x}')+\frac{\delta E_\mathrm{xc}[\rho]}{\delta\rho(\underline{x})}\right]\varphi_i(\underline{x})=\varepsilon_i\varphi_i(\underline{x}) \tag{9.6.5}$$

KS 方程形式上类似于单粒子薛定谔方程, 其中粒子处于单粒子有效势 V_eff 中:

$$V_\mathrm{eff}(\underline{x})=V(\underline{x})+\int \mathrm{d}^3x V_\mathrm{ee}(\underline{x}-\underline{x}')\rho(\underline{x}')+\frac{\delta E_\mathrm{xc}[\rho]}{\delta\rho(\underline{x})}$$

但这个有效势只是在 $E[\rho,V]$ 取极值的途径中人为产生的辅助势, 因此在这一点上, 波函数 φ_i 和拉格朗日乘子 ε_i 并没有确切的物理意义.

式 (9.6.4) 和式 (9.6.5) 需要联立自洽地求解, 它们一起构成了 KS 自洽方程组. **DFT/LDA 计算流程**表示如下:

(1) 选择电子密度的初始值 $\rho(\underline{x})$.

(2) 求解 KS 方程:

$$\left[-\frac{\boldsymbol{\nabla}^2}{2m_\mathrm{e}}+V(\underline{x})+\int \mathrm{d}^3x' V_\mathrm{ee}(\underline{x}-\underline{x}')\rho(\underline{x}')+\frac{\delta E_\mathrm{xc}[\rho]}{\delta\rho(\underline{x})}\right]\varphi_i(\underline{x})=\varepsilon_i\varphi_i(\underline{x})$$

(3) 计算电子密度:

$$\rho_\mathrm{new}(\underline{x})=\sum_{i=1}^{N}|\varphi_i(\underline{x})|^2$$

(4) 用 $\rho(\underline{x})=\rho_\mathrm{new}(\underline{x})$ 进行迭代直到收敛, 即让 $||\rho(\underline{x})-\rho_\mathrm{new}(\underline{x})||<\delta$, 其中, δ 是预先指定的小值.

显然, 为了实现上述流程, 仅需要知道交换关联泛函 $E_\mathrm{xc}[\rho]$ 的具体形式即可, 多体问题的困难现在已转移到确定 $E_\mathrm{xc}[\rho]$ 了. 目前采用的 LDA 方法是将交换关联能泛函写成如下积分形式:

$$E_\mathrm{xc}[\rho]\approx\int \mathrm{d}^3x\rho(\underline{x})\varepsilon_\mathrm{xc}\left(\rho(\underline{x})\right) \tag{9.6.6}$$

其中, $\varepsilon_\mathrm{xc}\left(\rho(\underline{x})\right)$ 是密度为 $\rho(\underline{x})$ 的相互作用均匀电子气中每个电子的交换关联能, 它很容易参数化. 实践中人们经常运用解析公式求其微扰解 (参见 von Barth U,

Hedin L. J. Phys. C: Solid State Phys., 1972, 5: 1629), 或者用量子蒙特卡罗方法来拟合出 $\varepsilon_{\mathrm{xc}}(\rho(\underline{x}))$ 的函数关系 (参见 Ceperly M, Alder B J. Phys. Rev. Lett., 1980, 45: 566). 这里我们仅给出使用得最多的蒙特卡罗方法途径.

定义 r_s 是满足如下关系的量:

$$\frac{4\pi}{3}(r_s a_0)^3 = \frac{1}{\rho} \tag{9.6.7}$$

其中, ρ 是均匀体系的电子数密度; $a_0 = \hbar^2/(me^2)$ 是玻尔半径. 利用均匀电子气中的如下交换能和关联能的关系式:

$$\begin{gathered}
\varepsilon_{\mathrm{x}}(r_s) = -0.916/r_s \\
\varepsilon_{\mathrm{c}}(r_s) = \begin{cases} -0.2846/(1+1.0529\sqrt{r_s}+0.3334) & (r_s \geqslant 1) \\ -0.0960+0.0622\ln r_s - 0.0232 r_s + 0.0040 r_s \ln r_s & (r_s \leqslant 1) \end{cases} \\
\varepsilon_{\mathrm{xc}}(r_s) = \varepsilon_{\mathrm{x}}(r_s) + \varepsilon_{\mathrm{c}}(r_s)
\end{gathered} \tag{9.6.8}$$

其中, 能量用里德伯单位 [Ry], 1[Ry]= $e^2/(2a_0)$. 由此可以拟合出 $\varepsilon_{\mathrm{xc}}(\rho(\underline{x}))$ 的函数关系.

二、LDA+DMFT 的哈密顿

传统的 LDA 不能处理有 d 电子或 f 电子的材料, 因为其中电子关联太强. 这些关联中最重要的是 d 电子或 f 电子之间的局域库仑作用 (Hartree 项已包含在 LDA 中了). 为了计及这些重要的局域库仑作用, 我们应该给 LDA 哈密顿补加上有局域库仑作用的哈密顿, 使得总哈密顿成为

$$\hat{H}_{\mathrm{LDA+DMFT}} = \hat{H}_{\mathrm{LDA}} + \hat{H}_{\mathrm{loc}} \tag{9.6.9}$$

由 KS 方程不难看出, 在 LDA 下, LDA 哈密顿为

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{\mathrm{LDA}} = & \sum_{\sigma}\int \mathrm{d}^3x \hat{\psi}_{\sigma}^{+}(\underline{x}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2 + V(\underline{x}) \right. \\
& \left. + \int \mathrm{d}^3x' \rho(\underline{x}') V_{\mathrm{ee}}(\underline{x}-\underline{x}') + \frac{\partial E_{xc}^{\mathrm{LDA}}(\rho(\underline{x}))}{\partial \rho(\underline{x})} \right] \hat{\psi}_{\sigma}(\underline{x})
\end{aligned} \tag{9.6.10}$$

其中, 场算符可以展开成如下形式:

$$\hat{\psi}_{\sigma}(\underline{x}) = \sum_{i\gamma} \hat{c}_{i\gamma\sigma}\varphi_{i\gamma}(\underline{x}) \tag{9.6.11}$$

式中, i 为格位指标; γ 为轨道指标. 实践中 $\varphi_{i\gamma}(\underline{x})$ 可以选为线性丸盒 (muffin-tin) 轨道 (参见 Anderson O K. Phys. Rev., 1975, B12: 3036) 或者选为万尼尔轨道. 将

式 (9.6.11) 代入式 (9.6.10), 得

$$\hat{H}_{\rm LDA}=\sum_{\langle ii'\rangle\gamma\gamma'\sigma}t_{i\gamma i'\gamma'}\hat{c}^{+}_{i\gamma\sigma}\hat{c}_{i'\gamma'\sigma} \tag{9.6.12}$$

其中, 紧束缚迁徙矩阵元 $t_{i\gamma i'\gamma'}$ 为

$$\begin{aligned}t_{i\gamma i'\gamma'}=&\int{\rm d}^3x\varphi^*_{i\gamma}(\underline{x})\left[-\frac{\hbar^2\boldsymbol{\nabla}^2}{2m}+V(\underline{x})\right.\\&\left.+\int{\rm d}^3x'\rho(\underline{x}')V_{\rm ee}(\underline{x}-\underline{x}')+\frac{\partial E^{\rm LDA}_{\rm xc}(\rho(\underline{x}))}{\partial\rho(\underline{x})}\right]\varphi_{i'\gamma'}(\underline{x})\end{aligned} \tag{9.6.13}$$

至于局域库仑作用哈密顿, 它的最一般形式为

$$\sum_{i\gamma\gamma'\lambda'\lambda\sigma\sigma'}U_{\gamma\gamma'\lambda'\lambda}\hat{c}^{+}_{i\gamma\sigma}\hat{c}^{+}_{i\gamma'\sigma'}\hat{c}_{i\lambda'\sigma'}\hat{c}_{i\lambda\sigma}$$

$$U_{\gamma\gamma'\lambda'\lambda}=\int{\rm d}^3x{\rm d}^3x'\varphi^*_{i\gamma}(\underline{x})\varphi^*_{i\gamma'}(\underline{x}')g(|\underline{x}-\underline{x}'|)\varphi_{i\lambda'}(\underline{x}')\varphi_{i\lambda}(\underline{x}) \tag{9.6.14}$$

其中, i 为格位指标; $\gamma,\gamma',\lambda',\lambda$ 为轨道指标; σ,σ' 为自旋指标; $g(|\underline{x}-\underline{x}'|)$ 为屏蔽库仑势. 但通常只要计及它的如下最重要矩阵元就足够了：该矩阵元仅包括两个不同的轨道指标且限制于局域 d 轨道或 f 轨道. 所以 LDA+DMFT 途径中通常采用如下形式的局域库仑作用哈密顿：

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\rm loc}=&\frac{U}{2}\sum_{i\gamma\sigma}\hat{n}_{i\gamma\sigma}\hat{n}_{i\gamma\bar{\sigma}}+\frac{U'}{2}\sum_{i\sigma\sigma',\gamma\neq\gamma'}\hat{n}_{i\gamma\sigma}\hat{n}_{i\gamma'\sigma'}+\frac{J}{2}\sum_{i\sigma\sigma',\gamma\neq\gamma'}\hat{c}^{+}_{i\gamma\sigma}\hat{c}^{+}_{i\gamma'\sigma'}\hat{c}_{i\gamma\sigma'}\hat{c}_{i\gamma'\sigma}\\&+\frac{J'}{2}\sum_{i\sigma,\gamma\neq\gamma'}\hat{c}^{+}_{i\gamma\sigma}\hat{c}^{+}_{i\gamma\bar{\sigma}}\hat{c}_{i\gamma'\bar{\sigma}}\hat{c}_{i\gamma'\sigma}-\sum_{i\sigma\gamma}\Delta\varepsilon\hat{n}_{i\gamma\sigma}\end{aligned} \tag{9.6.15}$$

其中, $\hat{n}_{i\gamma\sigma}=\hat{c}^{+}_{i\gamma\sigma}\hat{c}_{i\gamma\sigma}$, 并且轨道 γ,γ' 限于在元胞 i 中的 d 轨道或 f 轨道. 式 (9.6.15) 右边第一项是轨道内库仑排斥项, 第二项是轨道之间的库仑排斥项, 第三项是 Hund 交换项, 第四项是不同轨道之间的电子对迁徙项, 而最后一项则描述了 U,U',J 所包含的这样一些贡献, 它们也出现在 $\hat{H}_{\rm LDA}$ 的贡献中, 为了避免对这一部分贡献出现双重计数所以必须减掉, 这一点在后面讨论的受限 LDA 计算中能够自然地看出.

式 (9.6.14) 中的参量 U,U',J 和 J' 不是独立的. 首先, 如果没有外磁场等破坏时间反演 (TR) 对称性的因素, 就可以选取实值波函数 $\varphi_{i\gamma}(\underline{x})$, 从而直接由式 (9.6.14) 得知有 $J'=J$; 其次, U,U' 和 J 之间的关系在离子问题中已经从群论的观点加以确定了：$U=U'+2J$(参见 Tang H, Plihal M, Mills D L, et al. Magn. Mater., 1998, 187: 23). 由此可见, 式 (9.6.15) 中独立参量只有三个, 即 U,J 和 $\Delta\varepsilon$. 计算它们远非平庸, 还要作进一步的近似, 即在所谓的**受限 LDA**计算中来得到. 它

的基本思想是考虑一个格位 i 上的相互作用 d 电子或 f 电子与体系的其余部分处于运动学退耦状态的情形, 即有 $t_{i\gamma i'\gamma'}=0(\forall i',\gamma')$. 这样可以允许我们改变在这个退耦格位上的 d 电子或 f 电子数. 与此同时, 因 d 电子或 f 电子数发生改变, 其他电子将重新分布, 从而可以计及其他电子的屏蔽效应. 计算 U,J 和 $\Delta\varepsilon$ 的方法可参见文献 (Anisimov V I, Zaanen J, Anderson O K. Phys. Rev., 1991, B44: 943). 由于与场论方法无关, 这里不再详述.

三、LDA+DMFT 的计算流程

建立了 LDA + DMFT 哈密顿后, 我们就可以用 DMFT 来处理它. DMFT 首先将哈密顿 $\hat{H}_{\text{LDA+DMFT}}$ 映射成一个辅助的 Anderson 杂质问题, 其中有同样的库仑相互作用和一个 Weiss 函数 $\varUpsilon_0^{-1}=g_{\text{loc}}^{-1}+\varSigma_{\text{imp}}$. 这个 Anderson 杂质模型连同自洽条件 (或 Dyson 方程)

$$g_{\text{loc}}(\omega)=\sum_{\underline{k}}\frac{1}{\omega+\mu-\tilde{\varepsilon}^{\text{LDA}}(\underline{k})-\varSigma_{\text{imp}}(\omega)} \tag{9.6.16}$$

一起被自洽地求解. 其中, $\tilde{\varepsilon}^{\text{LDA}}(\underline{k})$ 由式 (9.6.18) 和式 (9.6.19) 确定. 注意: 最方便的是将 $\hat{H}_{\text{LDA}}$ 在 $\underline{k}$ 空间中加以表述并且在计及双重计数的修正 $\Delta\varepsilon$ 后, 有

$$\hat{H}_{\text{LDA}}-\sum_{i\gamma}\Delta\varepsilon\hat{n}_{i\gamma\sigma}=\sum_{\underline{k}\sigma\gamma\gamma'}\tilde{\varepsilon}_{\gamma\gamma'}^{\text{LDA}}\hat{c}_{\underline{k}\gamma\sigma}^{+}\hat{c}_{\underline{k}\gamma'\sigma} \tag{9.6.17}$$

其中, 对所有有 U 相互作用的轨道, 有

$$\tilde{\varepsilon}_{\gamma\gamma'}^{\text{LDA}}(\underline{k})=\varepsilon_{\gamma\gamma'}^{\text{LDA}}(\underline{k})-\delta_{\gamma\gamma'}\Delta\varepsilon \tag{9.6.18}$$

式中, $\varepsilon_{\gamma\gamma'}^{\text{LDA}}(\underline{k})$ 是 LDA 能带结构. 而对于所有无相互作用的轨道, 有

$$\tilde{\varepsilon}_{\gamma\gamma'}^{\text{LDA}}(\underline{k})=\varepsilon_{\gamma\gamma'}^{\text{LDA}}(\underline{k}) \tag{9.6.19}$$

我们把 **LDA+DMFT 计算流程**表示如下:

(1) 按前面介绍的通常的 **DFT/LDA 计算流程**计算, 给出 $\rho(\underline{x})$.

(2) 利用式 (9.6.13) 计算迁徙矩阵元 $t_{i\gamma i'\gamma'}$ 并计算其傅里叶变换即 LDA 能带结构 $\varepsilon^{\text{LDA}}(\underline{k})$:

$$\varepsilon_{\gamma\gamma'}^{\text{LDA}}(\underline{k})=\frac{1}{L}\sum_{\gamma\gamma'}t_{i\gamma i'\gamma'}\text{e}^{\text{i}\underline{k}\cdot(\underline{R}_i-\underline{R}_j)} \tag{9.6.20}$$

其中, L 是格位 $\underline{R}_i$ 的数目.

(3) 由所给的 $\rho(\underline{x})$, 作受限 LDA 计算, 求出 LDA+DMFT 哈密顿中的参量 U,J 和 $\Delta\varepsilon$.

(4) 由本章第四节中的 DMFT 计算流程求解有哈密顿 $\hat{H}_{\mathrm{LDA+DMFT}}$ 的多体问题, 得到杂质自能 $\Sigma_{\mathrm{imp}}(\mathrm{i}\omega_n)$.

(5) 由杂质自能 $\Sigma_{\mathrm{imp}}(\mathrm{i}\omega_n)$ 计算

$$g_{\underline{k}\sigma}(\mathrm{i}\omega_n) = \frac{1}{\mathrm{i}\omega_n + \mu - \tilde{\varepsilon}^{\mathrm{LDA}}(\underline{k}) - \Sigma(\mathrm{i}\omega_n)} \tag{9.6.21}$$

再作傅里叶变换可求得 $g_{i\gamma i'\gamma'\sigma}(\tau)$.

利用

$$g_{i\gamma i'\gamma'\sigma}(\tau = 0^+) = -\delta_{ii'}\delta_{\gamma\gamma'} + \langle \hat{c}^+_{i\gamma\sigma}\hat{c}_{i'\gamma'\sigma}\rangle \tag{9.6.22}$$

和

$$\rho(\underline{x}) = \sum_{\sigma} \langle \hat{\psi}^+_{\sigma}(\underline{x})\hat{\psi}_{\sigma}(\underline{x})\rangle = \sum_{i\gamma i'\gamma'\sigma} \varphi^*_{i\gamma}(\underline{x})\varphi_{i'\gamma'}(\underline{x})\langle \hat{c}^+_{i\gamma\sigma}\hat{c}_{i'\gamma'\sigma}\rangle \tag{9.6.23}$$

求出 $\rho_{\mathrm{new}}(\underline{x})$.

(6) 用 $\rho(\underline{x}) = \rho_{\mathrm{new}}(\underline{x})$ 进行迭代, 直到收敛.

和以上讨论的方法不同的一种重要途径是将 LDA+DMFT 方法表述成所谓 “**谱密度泛函理论**” (参见 Kotliar G, Savrasov S Y, Haule K, et al. Rev. Mod. Phys., 2006, 78: 865).

和 LDA+DMFT 方法不同的另一种意义深远的途径是 **GW+DMFT 方法**. 其中, 替代 LDA 的 GW 指的是自能的形式借助于格林函数 G 和屏蔽相互作用 W 的乘积来表达, 又叫 GW 近似(参见 Biermann S, Aryasetiawan F,Georges A. Phys. Rev. Lett., 2003, 90: 086402; Aryasetiawan F, Gunnarsson O. Rep. Prog. Phys., 1998, 61: 237).

第七节　强关联体系的规范场论

现代场论中一个有力的理论工具是规范场论. 它的概念能为研究强关联体系提供一种新的统一的观点, 并已广泛应用于量子自旋体系、量子霍尔体系、高温超导体以及拓扑绝缘体等诸多领域. 详细论述这些内容将超出本书的目标, 这里我们仅以量子霍尔体系和拓扑绝缘体为例作初步介绍. 这类体系中, 拓扑起着重要作用.

一、量子霍尔体系

在量子霍尔体系中能产生所谓 “量子霍尔效应”(QHE). 如果在 z 方向上对金属施加一磁场, 然后在 x 方向上通上直流电流, 那么在 y 方向上会获得一个横向电场 (霍尔电场), 利用它就可以定义所谓 “霍尔电导”. 在经典霍尔效应中, 在改变某些控制参量下, 霍尔电导能连续改变. 可是在 QHE 中, 霍尔电导却不能连续改变.

人们在强磁场和低温下的二维电子气中观测到 QHE, 这里维数是重要的. 因为 d 维体系的截面 $A = L^{d-1}$(L 为特征长度), 所以电导 G 与电导率 σ 的关系为

$$G = \sigma \frac{A}{L} = \sigma L^{d-2} \tag{9.7.1}$$

由此可知二维时电导与电导率相同. 这样从二维体系的微观物理所确定的量 σ 过渡到实验可观测量 G 时, 就不会受到依赖于实验装置的几何因素的影响, 否则将没有 "普适" 的霍尔电导能被观测到.

从半经典图像来看, 二维样品中的电子在磁场 H 作用下以回旋频率 $\omega_{\mathrm{c}} = eH/(mc)$ 沿圆形轨道运动, 这个回转运动的 y 分量类似于谐振子运动, 所以它的能级是量子化的且为 $\varepsilon = (n + 1/2)\hbar\omega_{\mathrm{c}}$, 这是所谓的朗道能级. 另外, 这个局域的回转运动将不会在样品内贡献出净电流, 然而在样品边缘, 由于电子不能完成整个圆形的回转, 它们将撞向边缘壁并反弹进行下一次回转的碰撞, 从而形成边缘电流, 如图 9.7.1 所示. 由于上下边缘的电流相反, 所以为了要有向右 (或向左) 的净电流, 就必须使得上下边缘有不同的电子数, 从而有不同的费米能级, 即有不同的电势, 这就是霍尔电压. QHE 中对量子电导有贡献的是边缘态.

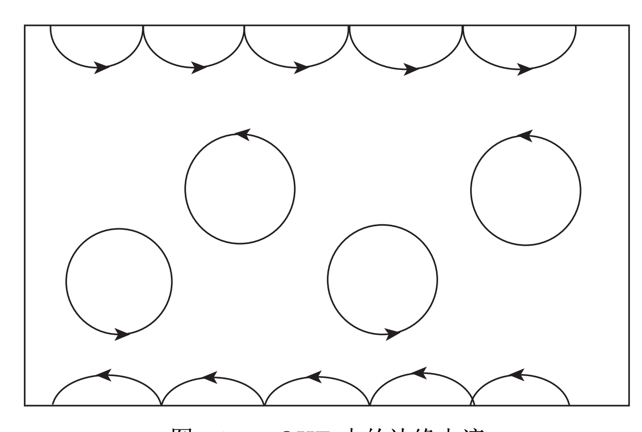


图 9.7.1　QHE 中的边缘电流

QHE 有如下一些重要性质: ①如果以 e^2/h 为单位, 则整数量子霍尔效应(IQHE) 中的霍尔电导 σ_{xy} 是一个整数, 而分数量子霍尔效应(FQHE) 中的霍尔电导则是一个分数; ② 在电导量子化值的平台上, 电流无耗散地流动. 造成这些性质的原因之一是体系的基态和最低激发态之间存在能隙 (体系不可压缩性). 在 IQHE 中是由于单粒子在外场中的运动所产生的动能能隙, 解释 IQHE 时不必引入电子–电子互作用, 但在 FQHE 中能隙的产生却是由于电子–电子互作用. 在 IQHE 中平台的解释需要无序的存在 (它能形成一定范围的局域态), 但是 FQHE 仅发生于样品非常干净的情形, 无序不能稳定 FQHE.

当可观测量是以整数 (或分数) 为单位来量子化时, 经常是与某种拓扑起源相联系的. 在下一小节我们还将看到标记霍尔电导的整数直接与拓扑不变量第一 Chern 数 C_1 相联系.

现在我们来建立和讨论在 QHE 以及拓扑绝缘体中都起重要作用的 Chern-Simons(CS) 规范场论. 首先注意到通常我们感兴趣的是体系的长波长及低能性质, 这样可以借助于建立低能有效场论来捕获体系的基本物理性质.

对于处于强外场中的 N 个费米子的相互作用二维体系, 它的一次量子化的哈密顿可以写成

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2m}[\underline{\hat{p}}_i + e\underline{A}^{\text{ext}}(\underline{x}_i)]^2 + \sum_{i=1}^{N} eA_0^{\text{ext}}(\underline{x}_i) + \sum_{i<j} V(\underline{x}_i - \underline{x}_j) \tag{9.7.2}$$

其中, $\underline{A}^{\text{ext}}$ 为矢势; A_0^{ext} 为标势, $\underline{\hat{p}}_i = -\mathrm{i}\boldsymbol{\nabla}_i$. 这里我们已设由于强的塞曼效应, 所有自旋都向上排列, 从而不用考虑自旋自由度.

然而我们可以通过幺正变换将上述费米子体系问题转换成玻色子体系问题, 其中, 这些玻色子将与外场 A^{ext} 以及 Chern-Simons 规范场 a 之和发生相互作用.

定义如下幺正算符:

$$U = \exp\left(\mathrm{i}\sum_{i<j} \theta\alpha_{ij}/\pi\right) \tag{9.7.3}$$

其中, α_{ij} 是 $\underline{x}_j - \underline{x}_i$ 与 x 轴的夹角, 故

$$\alpha_{ij} = \arctan\frac{y_j - y_i}{x_j - x_i} \tag{9.7.4}$$

这意味着 α_{ij} 是 $\underline{x}_j - \underline{x}_i$ 的函数, 它与动量算符无关. 进一步定义

$$e\underline{a}(\underline{x}_i) = \frac{\theta}{\pi}\sum_{j(\neq i)} \boldsymbol{\nabla}_i\alpha_{ij} \tag{9.7.5}$$

其中, $\boldsymbol{\nabla}_i$ 是对 $\underline{x}_i$ 求导的梯度算符. 利用 $[\underline{\hat{p}}_i, U] = -\mathrm{i}\boldsymbol{\nabla}_i U$, 得

$$\begin{aligned} U^{-1}\underline{\hat{p}}_i U &= U^{-1}(-\mathrm{i}\boldsymbol{\nabla}_i U) + U^{-1}U(-\mathrm{i}\boldsymbol{\nabla}_i) \\ &= \exp\left(-\mathrm{i}\sum_{i<j}\theta\alpha_{ij}/\pi\right)\left(\sum_{j(>i)}\theta\boldsymbol{\nabla}_i\alpha_{ij}/\pi\right)\exp\left(\mathrm{i}\sum_{i<j}\theta\alpha_{ij}/\pi\right) + (-\mathrm{i})\boldsymbol{\nabla}_i \\ &= e\underline{a}(\underline{x}_i) + \underline{\hat{p}}_i \end{aligned} \tag{9.7.6}$$

故可得幺正变换后的哈密顿为

$$\hat{H}' = U^{-1}\hat{H}U = \sum_{i=1}^{N}\frac{1}{2m}[\hat{\underline{p}}_i + e\underline{A}^{\text{ext}}(\underline{x}_i) + e\underline{a}(\underline{x}_i)]^2 + \sum_{i=1}^{N} eA_0^{\text{ext}}(\underline{x}_i) + \sum_{i<j} V(\underline{x}_i - \underline{x}_j) \tag{9.7.7}$$

而幺正变换后的波函数 φ 与变换前的波函数 ψ 之间的关系为

$$\varphi = U^{-1}\psi \tag{9.7.8}$$

尽管 ψ 是费米子体系的反称波函数, 只要我们在 U 中取 θ 为 π 的奇数倍, 则 $\varphi(\underline{x}_1, \underline{x}_2, \cdots, \underline{x}_N)$ 就成为用于描述玻色子体系的完全对称波函数. 事实上, 由式 (9.7.1) 可证 (参见附录 9C)

$$U^{-1}(\underline{x}_1, \cdots, \underline{x}_i, \cdots, \underline{x}_j, \cdots, \underline{x}_N) = \mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}\theta} U^{-1}(\underline{x}_1, \cdots, \underline{x}_j, \cdots, \underline{x}_i, \cdots, \underline{x}_N) \tag{9.7.9}$$

所以当 $\theta = (2n+1)\pi$ 时, 有

$$\begin{aligned}
& U^{-1}(\underline{x}_1, \cdots, \underline{x}_i, \cdots, \underline{x}_j, \cdots, \underline{x}_N) \\
=& -U^{-1}(\underline{x}_1, \cdots, \underline{x}_j, \cdots, \underline{x}_i, \cdots, \underline{x}_N)\varphi(\underline{x}_1, \cdots, \underline{x}_i, \cdots, \underline{x}_j, \cdots, \underline{x}_N) \\
=& U^{-1}(\underline{x}_1, \cdots, \underline{x}_i, \cdots, \underline{x}_j, \cdots, \underline{x}_N)\psi(\underline{x}_1, \cdots, \underline{x}_i, \cdots, \underline{x}_j, \cdots, \underline{x}_N) \\
=& -U^{-1}(\underline{x}_1, \cdots, \underline{x}_j, \cdots, \underline{x}_i, \cdots, \underline{x}_N) \times [-\psi(\underline{x}_1, \cdots, \underline{x}_j, \cdots, \underline{x}_i, \cdots, \underline{x}_N)] \\
=& \varphi(\underline{x}_1, \cdots, \underline{x}_j, \cdots, \underline{x}_i, \cdots, \underline{x}_N)
\end{aligned}$$

上式证明中, 我们利用了费米波函数的反称性. 上式正说明了波函数 φ 的玻色性.

由 $\hat{H}'$ 所描述的玻色子体系也有与原费米子体系相同的本征值. 事实上, 设

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

则

$$\hat{H}'\varphi = U^{-1}\hat{H}UU^{-1}\psi = U^{-1}\hat{H}\psi = EU^{-1}\psi = E\varphi$$

由 $\hat{H}'$ 的表达式 (9.7.7) 可以看出, 与外场矢势 $\underline{A}_{\text{ext}}$ 一样, 规范场 $\underline{a}$ 也起着矢势的作用. 再由式 (9.7.4) 和式 (9.7.5) 知

$$\underline{a}(\underline{x}_i) = \frac{\theta}{e\pi}\sum_{j(\neq i)}\frac{(y_j - y_i)\underline{e}_x - (x_j - x_i)\underline{e}_y}{|\underline{x}_j - \underline{x}_i|^2}$$

$$\equiv \sum_{j(\neq i)} \underline{\mathfrak{A}}(\underline{x}_i - \underline{x}_j) \tag{9.7.10}$$

其中, $\underline{e}_x$ 和 $\underline{e}_y$ 分别为 x 轴和 y 轴上的单位矢量. 式 (9.7.10) 中已定义了如下的规范势:

$$\underline{\mathfrak{A}}(\underline{x}) = \frac{\theta}{e\pi}\frac{-y\underline{e}_x + x\underline{e}_y}{|\underline{x}|^2} = \frac{\theta}{e\pi}\frac{1}{|\underline{x}|}\underline{e}_\beta \tag{9.7.11}$$

其中, $\underline{e}_\beta = -\sin\beta\underline{e}_x + \cos\beta\underline{e}_y$, β 为 $\underline{x} \equiv (x, y)$ 与正实轴 (x 轴) 的夹角.

我们可以把 $\underline{a}(\underline{x}_i)$ 解释为位于不同 $\underline{x}_j(j \neq i)$ 的所有粒子产生的作用于处在 $\underline{x}_i$ 的粒子上的和矢势. $\underline{\mathfrak{A}}(\underline{x})$ 则是从原点作用于 $\underline{x}$ 处的矢势, 它将产生一个垂直方向 (z 方向) 的 “磁场”:

$$\underline{b}(\underline{x}) \equiv b(\underline{x})\underline{e}_z \equiv \boldsymbol{\nabla} \times \underline{a}(\underline{x}) \tag{9.7.12}$$

其强度为 (参见附录 9D)

$$b(\underline{x}) = \varepsilon^{\alpha\beta}\partial_\alpha a_\beta = \phi_0\frac{\theta}{\pi}\sum_i \delta(\underline{x} - \underline{x}_i) \tag{9.7.13}$$

其中, $\phi_0 \equiv 2\pi/e$; $\alpha, \beta = 1, 2$(或 x, y); $\varepsilon^{11} = \varepsilon^{22} = 0$; $\varepsilon^{12} = -\varepsilon^{21} = 1$.

现在我们来考虑体系的量子场论表述. 首先由式 (9.7.7) 得知该玻色子体系的哈密顿为

$$\begin{aligned}\hat{H}' = &\int \mathrm{d}^2x\hat{\varphi}^+(\underline{x})\left\{\frac{1}{2m}[-\mathrm{i}\boldsymbol{\nabla} + eA^{\mathrm{ext}}(\underline{x}) + e\underline{a}(\underline{x})]^2 + eA_0^{\mathrm{ext}}(\underline{x})\right\}\hat{\varphi}(\underline{x})\\ &+ \frac{1}{2}\int \mathrm{d}^2x\int \mathrm{d}^2x'\hat{\varphi}^+(\underline{x})\hat{\varphi}^+(\underline{x}')V(\underline{x} - \underline{x}')\hat{\varphi}(\underline{x}')\hat{\varphi}(\underline{x})\end{aligned} \tag{9.7.14}$$

而场 $b(\underline{x})$ 的量子场论表述应为

$$\hat{b}(\underline{x}) = \int \mathrm{d}^2x'\hat{\varphi}^+(\underline{x}')\left[\phi_0\frac{\theta}{\pi}\delta(\underline{x} - \underline{x}_i)\right]\hat{\varphi}(\underline{x}') = \phi_0\frac{\theta}{\pi}\hat{\rho}(\underline{x}) \tag{9.7.15}$$

其中, $\hat{\rho}(\underline{x}) \equiv \hat{\varphi}^+(\underline{x})\hat{\varphi}(\underline{x})$ 是粒子密度算符. 式 (9.7.14) 和式 (9.7.15) 中的场算符 $\hat{\varphi}(\underline{x})$ 满足通常的玻色场对易关系:

$$\begin{cases}[\hat{\varphi}(\underline{x}), \hat{\varphi}(\underline{x}')] = [\hat{\varphi}^+(\underline{x}), \hat{\varphi}^+(\underline{x}')] = 0\\ [\hat{\varphi}(\underline{x}), \hat{\varphi}^+(\underline{x}')] = \delta(\underline{x} - \underline{x}')\end{cases} \tag{9.7.16}$$

由式 (9.7.10) 知, $\underline{a}$ 的量子场论表述应为

$$\hat{\underline{a}}(\underline{x}) = \int \mathrm{d}^2x'\hat{\varphi}^+(\underline{x}')\underline{\mathfrak{A}}(\underline{x} - \underline{x}')\hat{\varphi}(\underline{x}') \tag{9.7.17}$$

利用式 (9.7.11) 可知

$$\nabla \cdot \hat{\underline{a}}(\underline{x}) = \int \mathrm{d}^2 x' \hat{\varphi}^+(\underline{x}') \nabla \cdot \mathfrak{A}(\underline{x} - \underline{x}') \hat{\varphi}(\underline{x}') = 0 \tag{9.7.18}$$

下面我们将式 (9.7.18) 视为以库仑规范条件来作为规范固定条件, 并将式 (9.7.15) 作为约束条件纳入场论的路径积分表述中. 利用式 (9.7.13), 式 (9.7.15) 可写成 $e\hat{\rho} = \pi e \varepsilon^{\alpha\beta} \partial_\alpha \hat{a}_\beta / (\phi_0 \theta)$. 注意到在路径积分表述中, 应该将场算符用相应的相干态量来表示, 这样就需要如下转换：$\hat{a} \to a, \hat{\varphi} \to \varphi$ 等. 考虑到要将约束条件纳入路径积分, 可以将体系的配分函数写成

$$\begin{aligned} Z &= \int \mathfrak{D}\varphi \mathfrak{D}a_\beta \prod_{\underline{x},t} \delta \left(\frac{\pi e}{\phi_0 \theta} \varepsilon^{\alpha\beta} \partial_\alpha a_\beta(\underline{x}, t) - e\rho(\underline{x}, t) \right) \mathrm{e}^{\mathrm{i}S_{\mathrm{inc}}} \\ &= \int \mathfrak{D}\varphi \mathfrak{D}a_\beta \mathfrak{D}a_0 \exp \left\{ \mathrm{i} \int \mathrm{d}t \mathrm{d}^2 x a_0(\underline{x}, t) \left[\frac{\pi e}{\phi_0 \theta} \varepsilon^{\alpha\beta} \partial_\alpha a_\beta(\underline{x}, t) - e\rho(\underline{x}, t) \right] \right\} \mathrm{e}^{iS_{\mathrm{inc}}} \end{aligned} \tag{9.7.19}$$

其中, S_{inc} 是无约束条件时的作用量. 由此将式 (9.7.7) 代入可得

$$Z = \int \mathfrak{D}\varphi \mathfrak{D}a_\mu \mathrm{e}^{\mathrm{i}S_\varphi[\varphi, A_\mu^{\mathrm{ext}} + a_\mu] + \mathrm{i}S_a[a_\mu]} \tag{9.7.20}$$

其中, $\mu = 0, 1, 2$(或 t, x, y)

$$\begin{aligned} S_\varphi[\varphi, A_\mu + a_\mu] = &\int \mathrm{d}t \mathrm{d}^2 x \bigg\{ \varphi^+(\underline{x}, t) \left[\mathrm{i}\partial_0 - e(A_0^{\mathrm{ext}} + a_0) + \mu \right] \varphi(\underline{x}, t) \\ &+ \varphi^+(\underline{x}, t) \frac{1}{2m} \left[-\mathrm{i}\nabla + e(\underline{A}^{\mathrm{ext}} + \underline{a}) \right]^2 \varphi(\underline{x}, t) \bigg\} \\ &- \frac{1}{2} \int \mathrm{d}t \mathrm{d}^2 x \mathrm{d}^2 x' \varphi^+(\underline{x}, t) \varphi^+(\underline{x}', t) V(\underline{x} - \underline{x}') \varphi(\underline{x}', t) \varphi(\underline{x}, t) \end{aligned} \tag{9.7.21}$$

$$S_a[a_\mu] = \int \mathrm{d}t \mathrm{d}^2 x \frac{\pi e}{\phi_0 \theta} \varepsilon^{\alpha\beta} a_0(\underline{x}, t) \partial_\alpha a_\beta(\underline{x}, t) \tag{9.7.22}$$

显然式 (9.7.22) 不是规范不变的, 它仅在满足库仑规范条件下才成立. 但我们可以将 $S_a[a_\mu]$ 推广成如下规范不变形式 (即这种形式在规范变换 $a_\mu \to a_\mu + \partial_\mu f$ 下保持不变)：

$$S_{\mathrm{CS}}[a_\mu] = \int \mathrm{d}t \mathrm{d}^2 x \frac{\pi e}{2\phi_0 \theta} \varepsilon^{\mu\nu\lambda} a_\mu(\underline{x}, t) \partial_\nu a_\lambda(\underline{x}, t) \tag{9.7.23}$$

其中, $\varepsilon^{\mu\nu\lambda}$ 是全反称张量, 且 $\varepsilon^{012} = 1$. 上述作用量称为 **Chern-Simons 作用量**. 可以证明在库仑规范条件下, $S_{\mathrm{CS}}[a_\mu]$ 就变成 $S_a[a_\mu]$ 了.

这样, 式 (9.7.21) 和式 (9.7.23) 就是我们所研究的二维体系的精确表述形式, 但下面我们将采用近似方法来处理路径积分.

首先, 在库仑规范下, Chern-Simons 作用量 (9.7.23) 归结为式 (9.7.22) 中的 $S_a[a_\mu]$, 因而在傅里叶变换下它可以写成

$$S_{\rm CS}[a_\mu]=\frac{\pi e}{\theta\phi_0}\sum_{\underline{q}}{\rm i}\varepsilon^{\alpha\beta}q_\alpha a_0(-q)a_\beta(q) \tag{9.7.24}$$

另外, 由于库仑规范条件 $a_\beta(q)$ 可以用它的如下横向分量 $a_{\rm T}(q)$ 来表示:

$$a_\beta(q)=\frac{{\rm i}\varepsilon^{\beta\gamma}q_\gamma}{|\underline{q}|}a_{\rm T}(q) \tag{9.7.25}$$

不难看出式 (9.7.25) 保证了库仑规范条件 $(q_\beta a_\beta(q)=0)$ 的成立. 由式 (9.7.25) 可得

$$a_{\rm T}(q)=\frac{1}{|\underline{q}|}\left[{\rm i}q_x a_y(q)-{\rm i}q_y a_x(q)\right] \tag{9.7.26}$$

同样对于外场 $A_\alpha^{\rm ext}$, 在库仑规范下, 也满足

$$A_{\rm T}^{\rm ext}(q)=\frac{1}{|\underline{q}|}\left[{\rm i}q_x A_y^{\rm ext}(q)-{\rm i}q_y a_x^{\rm ext}(q)\right] \tag{9.7.27}$$

将式 (9.7.25) 代入式 (9.7.24), 则得

$$S_{\rm CS}[a_\mu]=\frac{\pi e}{2\theta\phi_0}\sum_{\underline{q}}|\underline{q}|\left[a_0(-q)a_{\rm T}(q)+a_{\rm T}(-q)a_0(q)\right] \tag{9.7.28}$$

其次, 利用 $\rho=\varphi^+\varphi$, 可以将 φ 写成 $\varphi=\sqrt{\rho}{\rm e}^{{\rm i}\Theta}$. 将式 (9.7.28) 代入式 (9.7.21) 可得

$$\begin{aligned}S_\theta[\Theta,A_\mu+a_\mu]=&\int{\rm d}t{\rm d}^2x\bigg\{\rho\left[-\partial_0\Theta-e(A_0^{\rm ext}+a_0)+\mu\right]\\&-\frac{1}{2m}\rho\left[\boldsymbol{\nabla}\Theta+e(\underline{A}^{\rm ext}+\underline{a})\right]^2-\frac{1}{8m}\frac{(\boldsymbol{\nabla}\rho)^2}{\rho}\bigg\}\\&-\frac{1}{2}\int{\rm d}t{\rm d}^2x{\rm d}^2x'\rho(\underline{x},t)V(\underline{x}-\underline{x}')\rho(\underline{x}',t)\end{aligned} \tag{9.7.29}$$

我们首先寻找与时间空间无关的稳相解, 在式 (9.7.29) 中取 $\rho(\underline{x})=\rho_0,\Theta(\underline{x})=\Theta_0$, $A_\mu^{\rm ext}+a_\mu=0$, 则 $S_\theta^0\sim TV\left(\rho_0\mu-\dfrac{1}{2}\rho_0^2\tilde{V}(\underline{q}=0)\right)$, 其中, $\tilde{V}(\underline{q})$ 是 $V(\underline{x}-\underline{x}')$ 的傅里叶变换. 由 $\delta S_\theta^0/\delta\rho_0=0$, 可得 $\rho_0=\mu/\tilde{V}(0)$. 现在令 $\rho=\rho_0+\delta\rho$, 代入式 (9.7.29) 中, 并且保留 $\delta\rho(\underline{x})$、$\partial_\mu\Theta$ 以及 $A_\mu^{\rm ext}+a_\mu$ 到二阶, 在这种近似下, 则有

$$\begin{aligned}S_\theta[\Theta,A_\mu+a_\mu]=&\int{\rm d}t{\rm d}^2x\left\{\delta\rho\left[-\partial_0\Theta-e(A_0^{\rm ext}+a_0)\right]-\frac{1}{2m}\rho_0\left[\boldsymbol{\nabla}\Theta+e(\underline{A}^{\rm ext}+\underline{a})\right]^2\right\}\\&-\frac{1}{2}\int{\rm d}t{\rm d}^2x{\rm d}^2x'\delta\rho(\underline{x},t)V(\underline{x}-\underline{x}')\delta\rho(\underline{x}',t)\end{aligned} \tag{9.7.30}$$

其中, 由于我们也考虑到在长波极限下含 $(\boldsymbol{\nabla}\delta\rho)^2$ 的项远小于相互作用项而将它加以忽略. 利用附录 7A 中的公式对 $\delta\rho$ 进行泛函积分以及作傅里叶变换就得长波极限下的作用量

$$\begin{aligned}S_\theta[\Theta, A_\mu + a_\mu] =& \sum_{\underline{q},\omega}\Bigg(\left\{-\mathrm{i}\omega\Theta(-q) - e\left[A_0^{\mathrm{ext}}(-q) + a_0(-q)\right]\right\}\frac{1}{2\tilde{V}(\underline{q})} \\ &\times\left\{\mathrm{i}\omega\Theta(q) - e\left[A_0^{\mathrm{ext}}(q) + a_0(q)\right]\right\} - \left\{-\mathrm{i}\underline{q}\Theta(-q) + e\left[\underline{A}^{\mathrm{ext}}(-q) + \underline{a}(-q)\right]\right\} \\ &\times\frac{\rho_0}{2m}\left\{\mathrm{i}\underline{q}\Theta(q) + e\left[\underline{A}^{\mathrm{ext}}(q) + \underline{a}(q)\right]\right\}\Bigg)\end{aligned} \tag{9.7.31}$$

其中, $q \equiv (\underline{q}, \omega)$.

现在我们对 S_θ 中的 Θ 进行路径积分, 由于 Θ 的最高幂次数是二次的, 所以可以通过对 Θ 配平方再积分, 能得到如下有效作用量：

$$S'[a'_\mu] = \frac{e^2}{2}\sum_q a'_\mu(-q)K_{\mu\nu}(q)a'_\nu(q) \tag{9.7.32}$$

式中, 重复指标自动求和, $a'_\mu \equiv A_\mu^{\mathrm{ext}} + a_\mu$, 且

$$K_{00}(q) = -\frac{\underline{q}^2\rho_0/(2m)}{\tilde{V}(\underline{q})\{\omega^2/[2\tilde{V}(\underline{q})] - \underline{q}^2\rho_0/(2m)\}} \tag{9.7.33}$$

$$K_{0\alpha}(q) = -\frac{q_\alpha\rho_0\omega}{2m\tilde{V}(\underline{q})\{\omega^2/[2\tilde{V}(\underline{q})] - \underline{q}^2\rho_0/(2m)\}} \tag{9.7.34}$$

$$K_{\alpha 0}(q) = K_{0\alpha}(q) \tag{9.7.35}$$

$$K_{\alpha\beta}(q) = -\frac{\rho_0}{m}\left\{\delta_{\alpha\beta} + \frac{q_\alpha q_\beta\rho_0/(2m)}{\omega^2/[2\tilde{V}(\underline{q})] - \underline{q}^2\rho_0/(2m)}\right\} \tag{9.7.36}$$

其中

$$K_{\mu\nu} \sim \frac{\delta^2 S'}{\delta a'_\mu \delta a'_\nu} \tag{9.7.37}$$

对应于流–流关联函数, 反映了体系的电磁响应. 注意: 由式 (9.7.31)～ 式 (9.7.35) 可知 $K_{\mu 0}(q) = q_\alpha K_{\mu\alpha}(q)/\omega$, 可以进一步将式 (9.7.32) 写成

$$\begin{aligned}S'[a'_\mu] =& e^2\sum_q\frac{K_{00}(q)}{2}\left[a'_0(-q) + \frac{\omega q_\alpha}{|\underline{q}|^2}a'_\alpha(-q)\right]\left[a'_0(q) + \frac{\omega q_\alpha}{|\underline{q}|^2}a'_\alpha(q)\right] \\ &- e^2\sum_q\frac{\rho_0}{2m}\left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{q_\alpha q_\beta}{|\underline{q}|^2}\right)a'_\alpha(-q)a'_\beta\end{aligned} \tag{9.7.38}$$

利用库仑规范条件 $q_\alpha a'_\alpha = q_\alpha(A_\alpha^{\text{ext}} + a_\alpha) = 0$ 以及式 (9.7.25), 式 (9.7.38) 又可以写成如下形式:

$$\begin{aligned} S'[a_\mu + A_\mu^{\text{ext}}] &= e^2 \sum_q \frac{K_{00}(q)}{2} \left[a_0(-q) + A_0^{\text{ext}}(-q)\right] \left[a_0(q) + A_0^{\text{ext}}(q)\right] \\ &= -e^2 \sum_q \frac{\rho_0}{2m} \left[a_{\text{T}}(-q) + A_{\text{T}}^{\text{ext}}(-q)\right] \left[a_{\text{T}}(q) + A_{\text{T}}^{\text{ext}}(q)\right] \end{aligned} \quad (9.7.39)$$

总的有效作用量为

$$S_{\text{eff}}[a_\mu, A_\mu^{\text{ext}}] = S_{\text{CS}}[a_\mu] + S'[a_\mu + A_\mu^{\text{ext}}] \quad (9.7.40)$$

现在可以进一步对 a_0 和 a_α 积分, 积分后的 S_{eff} 成为

$$\begin{aligned} S_{\text{eff}}[A_\mu^{\text{ext}}] &= e^2 \sum_q \frac{\tilde{K}_{00}(q)}{2} A_0^{\text{ext}}(-q) A_0^{\text{ext}}(q) + e^2 \sum_q \frac{\tilde{K}_{\text{TT}}(q)}{2} A_{\text{T}}^{\text{ext}}(-q) A_{\text{T}}^{\text{ext}}(q) \\ &= e^2 \sum_q \frac{\tilde{K}_{0\text{T}}(q)}{2} A_0^{\text{ext}}(-q) A_{\text{T}}^{\text{ext}}(q) + e^2 \sum_q \frac{\tilde{K}_{\text{T}0}(q)}{2} A_{\text{T}}^{\text{ext}}(-q) A_0^{\text{ext}}(q) \end{aligned} \quad (9.7.41)$$

其中

$$\tilde{K}_{00}(q) = \frac{K_{00}(q)|\underline{q}|^2/(2\theta)^2}{K_{00}(q)\rho_0/m - |\underline{q}|^2/(2\theta)^2} \quad (9.7.42)$$

$$\tilde{K}_{\text{TT}}(q) = -\frac{(\rho_0/m)|\underline{q}|^2/(2\theta)^2}{K_{00}(q)\rho_0/m + |\underline{q}|^2/(2\theta)^2} \quad (9.7.43)$$

$$\tilde{K}_{0\text{T}}(q) = \frac{K_{00}(q)(\rho_0/m)|\underline{q}|/(2\theta)}{K_{00}(q)\rho_0/m + |\underline{q}|^2/(2\theta)^2} \quad (9.7.44)$$

$$\tilde{K}_{\text{T}0}(q) = \tilde{K}_{0\text{T}}(q) \quad (9.7.45)$$

由于我们感兴趣的是 $\omega, |\underline{q}| \to 0$ 的低能极限, 所以在式 (9.7.42)~ 式 (9.7.44) 的分母中忽略 $|\underline{q}|^2/(2\theta)^2$, 并利用式 (9.7.27) 同时将 $A_0^{\text{ext}}(q)$ 用普遍的规范不变项 $A_0^{\text{ext}}(q) + \omega q_\alpha A_\alpha^{\text{ext}}(q)/|\underline{q}|^2$ 来代替, 则有效作用量为

$$\begin{aligned} S_{\text{eff}}[A_\mu^{\text{ext}}] =& \frac{e^2}{2} \sum_q \frac{|\underline{q}|}{2\theta} \left[A_0^{\text{ext}}(-q) + \frac{\omega}{|\underline{q}|^2} q_\alpha A_\alpha^{\text{ext}}(-q)\right] \\ & \times \frac{1}{|\underline{q}|} \left[\mathrm{i} q_x A_y^{\text{ext}}(q) - \mathrm{i} q_y A_x^{\text{ext}}(q)\right] + (q \to -q) \\ =& \frac{e^2}{4\theta} \sum_q A_0^{\text{ext}}(-q) \left[\mathrm{i} q_x A_y^{\text{ext}}(q) - \mathrm{i} q_y A_x^{\text{ext}}(q)\right] \end{aligned}$$

$$+ A_0^{\text{ext}}(q)\left[\mathrm{i}q_y A_x^{\text{ext}}(-q) - \mathrm{i}q_x A_y^{\text{ext}}(-q)\right]$$

$$+ \mathrm{i}\omega\left[A_x^{\text{ext}}(-q)A_y^{\text{ext}}(q) - A_y^{\text{ext}}(-q)A_x^{\text{ext}}(q)\right] \tag{9.7.46}$$

由于在作用量中, 电流电势的耦合是以 $\underline{A}^{\text{ext}} \cdot j$ 的形式出现的 (参见式 (1.4.104)), 所以在 x 方向的电流可由下式求出：

$$j_x(q) = \frac{\delta S_{\text{eff}}[A_\mu^{\text{ext}}]}{\delta A_x^{\text{ext}}(-q)} = \frac{e^2}{2\theta}[\mathrm{i}q_y A_0^{\text{ext}}(q) + \mathrm{i}\omega A_y^{\text{ext}}(q)] \tag{9.7.47}$$

它的傅里叶变换为

$$j_x(\underline{x}, t) = \frac{e^2}{2\theta}[\partial_y A_0^{\text{ext}}(\underline{x}, t) - \partial_t A_y^{\text{ext}}(\underline{x}, t)] = \frac{e^2}{2\theta}E_y(\underline{x}, t) \tag{9.7.48}$$

其中, $E_y(\underline{x}, t)$ 是电场在 y 方向上的分量. 根据熟知公式

$$j_x(\underline{x}, t) = \sigma_{xy}E_y(\underline{x}, t) \tag{9.7.49}$$

就得到

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{2\theta} = \frac{e^2}{2(2n+1)\pi}$$

若令

$$\nu = \frac{1}{2n+1} \tag{9.7.50}$$

并且将自然单位中的 $\hbar$ 加以恢复并利用 $h = 2\pi\hbar$, 则有

$$\sigma_{xy} = \nu\frac{e^2}{h} \tag{9.7.51}$$

这样由低能有效理论给出的是分数量子电导.

在前面的讨论中是将二维费米子体系映射成与 Chern-Simons 规范场 a_μ 相耦合的玻色子体系, 我们也可以将二维费米子体系映射成与 a_μ 相耦合的费米子体系, 只要适当选择 $\theta = 2n\pi$ 即可, 这很易由式 (9.7.9) 看出.

我们知道, 交换两粒子前后的波函数之间可以写成

$$\psi(\cdots, \underline{x}_i, \cdots, \underline{x}_j, \cdots) = \mathrm{e}^{i\alpha}\psi(\cdots, \underline{x}_j, \cdots, \underline{x}_i, \cdots) \tag{9.7.52}$$

其中, 交换两粒子产生的统计因子由相因子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}$ 给出. 当体系具有时间或空间反演对称性时, 将有 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}$, 故 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha} = \pm 1$, 因而粒子只能是玻色子或费米子. 但是在时间或空间反演对称性被破坏的情形 (如存在外磁场时的霍尔体系), 可以存在 α 取 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha} \neq \pm 1$ 值的粒子, 叫任意子(anyons). 我们可以类比 Aharonov-Bohm(A-B) 效

应来加以理解. 一方面, 当一个带电粒子沿磁通为 $\varPhi$ 的闭合回路 C 绕一圈后, 则会产生一个 A-B 相因子:

$$\exp\left\{\mathrm{i}e\oint_C \mathrm{d}\underline{x}\cdot\underline{A}\right\} = \exp\left(\mathrm{i}2\pi\varPhi/\phi_0\right) \tag{9.7.53}$$

其中, $\phi_0 \equiv 2\pi/e$ 是磁通量量子, 这里我们仍使用了自然单位. 另外, 当粒子 1 和粒子 2 交换时 (图 9.7.2), 可以看成粒子 2 从粒子 1 的左端绕着粒子 1 转半圈到粒子 1 的右端, 也就相当于绕粒子 1 转了一整圈的二分之一.

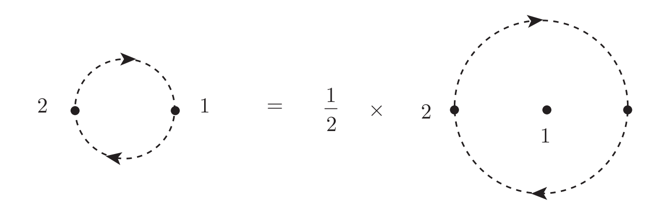


图 9.7.2　两粒子交换

如果能给粒子联系一个通量$\varPhi = \dfrac{\theta}{\pi}\phi_0$, 则当两个粒子交换时就能产生相因子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}$. 如果粒子原来的相因子为 α, 则总的相因子为 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\theta+\alpha)}$, 由此可见粒子的统计是可以改变的.

以上讨论仅局限于高斯近似. 有效场论的更深入的讨论能给出更一般的霍尔电导平台的值: $\nu = n/(2mn+1)$ $(m, n \in \mathbb{N})$, 也能给出准粒子的分数电荷及分数统计等, 这里不再详述, 可参考文献 (Altland A, Simons B. Condensed Matter Field Theory. 世界科学出版公司, 2006).

二、拓扑绝缘体

拓扑绝缘体分为二维拓扑绝缘体和三维拓扑绝缘体. 它是一种内部存在带隙的绝缘态, 而表面 (或边缘) 存在无带隙金属态的具有强自旋轨道耦合作用的材料. 在实验上已陆续实现了若干拓扑绝缘体, 例如, HeTe/CdTe 量子阱 (二维拓扑绝缘体), 以及 $\mathrm{Bi}_{1-x}\mathrm{Sb}_x$、$\mathrm{Bi_2Se_3}$、$\mathrm{Bi_2Te_3}$(三维拓扑绝缘体) 等.

上一小节介绍了量子霍尔效应, 实现这种效应需要强磁场. 然而强磁场会限制 QHE 的实际应用, 所以人们探究如何在无外加磁场下来实现类似的效应. 一个自然的方向就是利用电子的自旋轨道耦合作用 (参见第六章第五节), 使得在无外加磁场时仍能实现不同自旋方向的载流子在空间上的分离, 产生所谓的量子自旋霍尔效应(QSHE). 实现这种效应的体系就是二维拓扑绝缘体 (即量子自旋霍尔绝缘体). 由于磁场的存在, 量子霍尔态属于明显的破坏时间反演 (TR) 对称性的拓扑类, 而 QSH 态却属于在 TR 下不变的拓扑类.

和 QHE 一样, QSHE 中的电子也是沿边缘传播的 (当然材料的内部仍是绝缘体), 不同的是 QHE 中电子在每个边缘上只沿一个方向. 但在 QSHE 中, 每个边缘上若有一个 $(\underline{k},\uparrow)$ 的边缘态, 也有一个对应 $(-\underline{k},\downarrow)$ 的边缘态, 这样自旋向上的电子沿某个方向运动, 那么就有自旋向下的电子向相反方向运动. 它们数目相等, 因此净电流为零, 但有一个净的自旋流, 并且这个自旋流的自旋霍尔电导也是量子化的. 如图 9.7.3 所示. 其中, (a) 对应的是量子霍尔体系, (b) 对应的是量子自旋霍尔绝缘体, 上下方向的箭头代表电子自旋指向. 这里自旋霍尔电导定义为 $j_x^{\uparrow}-j_x^{\downarrow}=\sigma_{xy}^{(\mathrm{s})}E_y$.

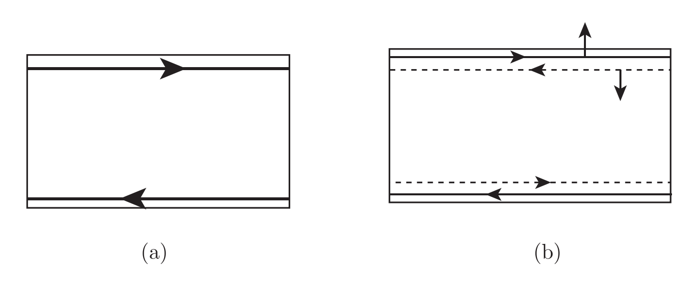


图 9.7.3 QH 体系和 QSH 体系的连缘态

从能带结构看, 如图 9.7.4 所示, (a) 对应的是普通绝缘体, (b) 对应的是量子霍尔绝缘体, (c) 为时间反演不变的拓扑绝缘体. 其中虚线代表边缘态, 这些边缘态连接体系的价带顶和导带底; 水平直线代表费米面.

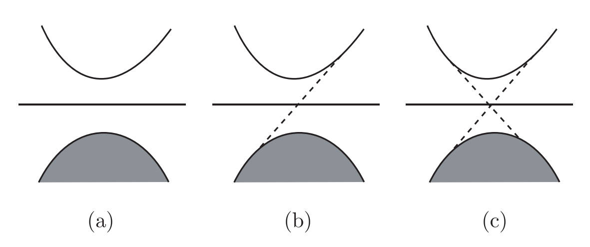


图 9.7.4 三种体系的能带结构示意图

虽然 QSHE 的边缘态同时有向前和向后的通道, 但自旋电流却受到时间反演对称性的保护. 非磁性杂质引起的背散射是被禁止的, 这是因为受时间反演性的要求, 动量相反的电子的自旋取向也相反, 而非磁性杂质的散射不能翻转自旋. 此外, 任何材料的非拓扑形变也不会使状态发生重大改变.

在前面对量子霍尔体系的的介绍中, 我们侧重于从规范场论而不是从拓扑的角度来加以讨论. 但事实上量子霍尔电导是作为拓扑不变量而出现的. 在第八章中, 我们已经知道对于 "传统的" 破缺对称态, 低能有效场论完全由序参量、对称性和维度确定. 对称性破缺意味着序参量不为零的有序相的出现. 传统上人们用破缺对称和与之联系的序参量来对体系的序和普适类进行划分, 但是这种途径不能应用于

QH 态. 首先, 因为基态的简并性依赖于定义这些态的二维闭空间的亏格 (genus)g; 其次, 处于这些态的体系的某些基本性质 (如量子化的霍尔电导) 对材料参数的平滑变化不敏感, 除非体系历经量子相变才会改变. 所以这些态必然含有不同类型的序叫拓扑序. 拓扑序的概念经常用来表征复杂关联的 FQHE 态 (参见 Tsui D C, Stormer H L, Gossard A C. Phys. Rev. Lett, 1982, 48: 1559), 这种态需要一个内在的多粒子途径来了解 (正如上一小节中所做的那样).

但是拓扑也应用于更简单的 IQHE 态以及拓扑绝缘体. 量子体系的拓扑态也由低能有效场论来加以描述, 此时有效场论一般涉及拓扑项, 它可以描述状态的拓扑性质, 其中拓扑项的系数可以认证为体系的拓扑序参量. 例如, 对于 QH 体系, Chern-Simons 项就是拓扑项.

考虑从基底流形 (在我们关心的问题中, 为 d 维单位球 S^d) 到目标空间 (靶空间)T 的映射 (不妨称这种映射为 "场")$\phi{:}S^d \to T$. 两个场 ϕ_1 和 ϕ_2, 若它们能相互连续形变成彼此, 就说 ϕ_1 和 ϕ_2 是拓扑等价的. 拓扑等价于某给定场 ϕ 的所有场形成等价类, 记为 $[\phi]$. 映射 $\phi{:}S^d \to T$ 的所有拓扑等价类的集合 $\{[\phi]\}$ 称为第 d 同伦群, 记为 $\pi_d(T)$.

如果我们将 IQH 体系的 Chern-Simons 作用量写成

$$S_{\mathrm{CS}} = \frac{C_1}{4\pi}\int \mathrm{d}t d^2 x \varepsilon^{\mu\nu\lambda} a_\mu(\underline{x},t)\partial_\nu a_\lambda(\underline{x},t) \tag{9.7.54}$$

的形式, 其中, C_1(第一 Chern 数) 可以表述成格林函数 G 的泛函 $C_1 = C_1[G(k)]$(参见 Wang Z ,Qi X L, Zhang S C. Phys. Rev. Lett., 2010, 105: 256803), 设 G 是非奇异的, 我们就有一个从三维动量空间 ($k \equiv (\underline{k},\omega)$) 到非奇异格林函数 (属于群 $\mathrm{GL}(n,\mathbb{C})$) 空间的映射, 它的第三同伦群由一个整数来标记 (参见上面所引文献):

$$\pi_3\left(\mathrm{GL}(n,\mathbb{C})\right) \cong \mathbb{Z} \tag{9.7.55}$$

其中, $\mathbb{Z}$ 代表整数. 对于这个同伦类, 绕数(winding number, TKNN 量子数) 正是由 C_1 来度量的. 虽然 Chern 数这个拓扑不变量生根于纤维丛这种数学理论, 但可以借助于与布洛赫波函数 (相应态矢量为 $|u(\underline{k})\rangle$) 相联系的 Berry 相来从物理上加以了解. 只要当 $\underline{k}$ 绕一围道转一圈时没有偶然简并出现, 那么 $|u(\underline{k})\rangle$ 将获得一个确定的 Berry 相, 它由

$$\underline{A}(k_x,k_y) = \mathrm{i}\langle u(\underline{k})|\boldsymbol{\nabla}_k|u(\underline{k})\rangle \tag{9.7.56}$$

的线积分给出, 而这又可以表达为 Berry 通量

$$F = \boldsymbol{\nabla}_k \times A(k_x,k_y) \tag{9.7.57}$$

的面积分. 而 Chern 数 C_1 就是布里渊区中总的 Berry 通量:

$$C_1 = \frac{1}{2\pi}\int d^2kF \tag{9.7.58}$$

(参见 Thouless D J, et al. Phys. Rev. Lett., 1982, 49: 405).

将式 (9.7.54) 对 a_μ 求泛函导数, 就可以得到电流 $j_\mu = C_1\varepsilon^{\mu\nu\lambda}\partial_\nu a_\lambda/(2\pi)$, 其空间分量为 $j_i = C_1\varepsilon^{ij}E_j/(2\pi)(i,j=x,y)$, 由此可知整数霍尔电导为

$$\sigma_{xy} = \frac{C_1}{2\pi} \to C_1\frac{e^2}{h} \tag{9.7.59}$$

其中, 我们恢复了电导的单位. 由此可见, 整数霍尔电导由拓扑不变量第一 Chern 数表征. 注意: 非拓扑的麦克斯韦项中比 CS 项含有更多的导数, 因而从重整化群的意义上看, 麦克斯韦项与低能的关系更小, 特别是 IQH 态的拓扑响应完全由 CS 项确定.

因为 CS 项能在所有偶数 d 维空间 (即奇数 $d+1$ 维时间空间) 中存在, 所以 QH 态的拓扑物理能推广到这样的维数. 关键点在于时间反演 (TR) 下的不变性. 在 4+1 维时间空间维数, Chern-Simons 作用量的形式为

$$S_{\mathrm{CS}} = \frac{C_2}{24\pi^2}\int dtd^4x\varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma\lambda}a_\mu\partial_\nu a_\rho\partial_\sigma a_\lambda \tag{9.7.60}$$

其中, 拓扑项系数为第二 Chern 数 C_2, 它的第 5 同伦群也由一个整数来标记:

$$\pi_5\left(\mathrm{GL}(n,\mathbb{C})\right) \cong \mathbb{Z} \tag{9.7.61}$$

注意: 利用在 TR 下, $a_0 \to a_0, \underline{a} \to -\underline{a}$, 故 CS 项就具有明显的 TR 不变性, 这种从 2+1 三维的 QH 绝缘态推广成的 4+1 维 TR 不变的绝缘态正是一种基础态, 所有二维和三维 TR 不变的拓扑绝缘体都可以由它导出. 导出的方法是用一种称为 “维数约化” 的方案 (参见 Qi X L,Zhang S C. Phys. Rev. Lett., 2008, 101:086802). 根据这种方案, 我们可以将式 (9.7.60) 对额外的第四空间坐标 x_4 进行积分 (考虑 x_4 的几何是一个紧致的小圆 o), 令

$$\vartheta(x,t) = C_2\oint_o dx_4 a_4(x,x_4,t) \tag{9.7.62}$$

其中, $x \equiv (t,x_1,x_2,x_3)$. 在恢复了原有单位后, 积分得

$$S_\vartheta = \frac{\alpha}{32\pi^2}\int dtd^3x\vartheta(x,t)\varepsilon^{\mu\nu\rho\lambda}F_{\mu\nu}(x,t)F_{\rho\lambda}(x,t) \tag{9.7.63}$$

其中, $F_{\mu\nu}$ 是规范势 a 对应的场强; $\alpha \equiv e^2/(\hbar c)$ 是精细结构常数. 这样我们得到了描述三维拓扑绝缘体的 3+1 维有效拓扑项, 但是为了保持时间空间平移不变性, 可

以将 $\vartheta(x,t)$ 取成一个常数参量. 此时若取 $C_2=1$, 则由式 (9.7.62) 和斯托克斯公式可知, ϑ 是穿过小圆 o 的磁通量, 因而即使 $\vartheta\to\vartheta\pm 2\pi$ 也不会改变原来的物理. 由于 TR 能将 ϑ 变成 $-\vartheta$, 因此有且只有两个 ϑ 值才能与 TR 对称一致, 那就是 $\vartheta=0$ 和 $\vartheta=\pi$. 这是由于对于 $\vartheta=\pi$, 它在 TR 下变成 $\vartheta=-\pi$, 但这又和 $\vartheta=\pi$ 本身等价. 因此可知 ϑ 能够对 TR 不变的三维拓扑绝缘体产生一个 $\mathbb{Z}_2$ 划分：$\vartheta=0$ 对应于拓扑平庸类, $\vartheta=\pi$ 对应于拓扑非平庸类. 此时对于一般相互作用体系, 可定义拓扑序参量为 $P_3=\vartheta/(2\pi)$. 所以 P_3 仅能取量子化值：0 或 $\dfrac{1}{2}(\mathrm{mod}\mathbb{Z})$.

尽管拓扑响应仍由拓扑项决定, 但与 2+1 维情形不同, 在 3+1 维中, 麦克斯韦项在低能下同样重要, 所以计及拓扑项后将得到拓扑绝缘体的修正了的麦克斯韦方程组, 称为场论中的轴子电动力学(参见 Wilezek F. Phys. Rev. Lett., 1987, 58: 1799).

和前面类似, 空间维数可进一步约化到二维的 $\mathbb{Z}_2$ 拓扑绝缘体, 此时的 2+1 维拓扑序参量为 $P_2=0$ 或 $P_2=\dfrac{1}{2}(\mathrm{mod}\mathbb{Z})$. $P_2=0$ 对应于拓扑平庸的 TR 不变绝缘体, 而 $P_2=\dfrac{1}{2}(\mathrm{mod}\mathbb{Z})$对应于拓扑非平庸的 TR 不变绝缘体, 它对 2+1 维中相互作用量子自旋霍尔体系是成立的.

上述的 (拓扑) 规范场论在无相互作用的极限情形可以约化成拓扑能带论, 后者在二维时是以一个 $\mathbb{Z}_2$ 拓扑数 ν, 在三维时是以 4 个 $\mathbb{Z}_2$ 拓扑数 $(\nu_0;\nu_1,\nu_2,\nu_3)$ 来进行分类的, 可参见文献 (Kane C L, Mele E J. Phys. Rev. Lett., 2005, 95: 146802). 这里不再详述.

对于分数量子霍尔态的较为复杂的拓扑分类可参见文献 (Wen X G, Zee A. Phys. Rev., 1992, B46: 2290).

拓扑绝缘体有一个重要的推广：在拓扑绝缘体与 s 波超导的界面上, 由于所谓的近邻效应, 可以形成拓扑超导体(参见 Hasan Z M, Kane C L. Rev. Mod. Phys., 2010, 82: 3045; Qi X L, Zhang S C. Rev. Mod. Phys., 2011, 83: 1057).

拓扑绝缘体在量子信息和量子计算等诸多领域里有着潜在的重要应用价值.

附录 9A　式 (9.2.28) 的证明

μ_{c} 是传导电子的化学势. 可是正则的局域传导电子的自能 $\Sigma_{\mathrm{c}\sigma}(\mathrm{i}\omega_n)$ 却不能简单地通过取 $\lambda\to\infty$ 来从巨正则系综得到, 因为传导电子密度在 $Q=0$ 子空间有非零期待值, 但它却可以从 Anderson 哈密顿式 (9.2.1)~ 式 (9.2.3) 直接得出, 这是因为局域传导电子的 t 矩阵 $t_\sigma(\mathrm{i}\omega_n)$ 满足

$$G_{\mathrm{c}\sigma}(\mathrm{i}\omega_n)\equiv G^0_{\mathrm{c}\sigma}(\mathrm{i}\omega_n)+G^0_{\mathrm{c}\sigma}(\mathrm{i}\omega_n)t_\sigma(\mathrm{i}\omega_n)G^0_{\mathrm{c}\sigma}(\mathrm{i}\omega_n) \tag{9A.1}$$

正比于投影后的 d 电子的完全格林函数 (参见附录 9 B):

$$t_\sigma(\mathrm{i}\omega_n) = \tilde{V}^2 G_{\mathrm{d}\sigma} \tag{9A.2}$$

故将式 (9.2.25) 代入式 (9.2.24), 并利用式 (9.2.22) 可得

$$\Sigma_{\mathrm{c}\sigma}(\mathrm{i}\omega_n) = \frac{\tilde{V}^2 G_{\mathrm{d}\sigma}(\mathrm{i}\omega_n)}{1+\tilde{V}^2 G^0_{\mathrm{c}\sigma}(\mathrm{i}\omega_n) G_{\mathrm{d}\sigma}(i\omega_n)} \tag{9A.3}$$

显然式 (9.2.28) 是式 (9A.3) 作解析延拓并对赝粒子量作代换 $\omega \to \omega+\lambda$ 后所得结果. 这样, 借助于 $G_{\mathrm{d}\sigma}$ 就可以求出正则的局域传导电子的自能.

附录 9B　式 (9A.2) 的证明

在式 (5.6.7)

$$\omega\langle\langle \hat{A};\hat{B}:\omega\rangle\rangle = \left\langle \left[\hat{A},\hat{B}\right]_{\mp} \right\rangle + \left\langle\left\langle \left[\hat{A},\hat{H}^\mu\right];\hat{B}:\omega \right\rangle\right\rangle \tag{9B.1}$$

中, 取 $\hat{A}=\hat{c}_{\underline{k}\sigma}, \hat{B}=\hat{c}^+_{\underline{k}'\sigma}$, 则得

$$\left(\omega-\varepsilon_{\underline{k}}\right) G_{k\sigma,\underline{k}'\sigma}(\omega) = \delta_{\underline{k}\underline{k}'} + \tilde{V} G_{\mathrm{d}\sigma,\underline{k}'\sigma} \tag{9B.2}$$

其中, $G_{\mathrm{d}\sigma,k'\sigma} \equiv \langle\langle \hat{d}_\sigma;\hat{c}^+_{\underline{k}'\sigma}:\omega\rangle\rangle$. 再在式 (5.6.16)

$$\omega\langle\langle \hat{A};\hat{B}:\omega\rangle\rangle = \langle[\hat{A},\hat{B}]_{\mp}\rangle - \langle\langle \hat{A};[\hat{B},\hat{H}^\mu]:\omega\rangle\rangle \tag{9B.3}$$

中, 取 $\hat{A}=\hat{d}_\sigma, \hat{B}=\hat{c}^+_{\underline{k}'\sigma}$, 则得

$$\left(\omega-\varepsilon_{\underline{k}'}\right) G_{\mathrm{d}\sigma,\underline{k}'\sigma}(\omega) = \tilde{V} G_{\mathrm{d}\sigma,\mathrm{d}\sigma}(\omega) \tag{9B.4}$$

故由式 (9B.2) 和式 (9B.4) 可得

$$G_{\underline{k}\sigma,\underline{k}'\sigma}(\omega) = \frac{\delta_{\underline{k}\underline{k}'}}{\omega-\varepsilon_{\underline{k}}} + \frac{\tilde{V}}{\omega-\varepsilon_{\underline{k}}} G_{\mathrm{d}\sigma,\mathrm{d}\sigma}(\omega) \frac{\tilde{V}}{\omega-\varepsilon_{\underline{k}'}} \tag{9B.5}$$

它的局域形式可写成

$$G_{\mathrm{c}\sigma}(\omega) = \sum_{\underline{k},\underline{k}'} G_{\underline{k}\sigma,\underline{k}'\sigma}(\omega) = G^0_{\mathrm{c}\sigma}(\omega) + G^0_{\mathrm{c}\sigma}(\omega) t_\sigma(\omega) G^0_{\mathrm{c}\sigma}(\omega) \tag{9B.6}$$

由此可知 t 矩阵为

$$t(\omega) = \tilde{V}^2 G_{\mathrm{d}\sigma,\mathrm{d}\sigma}(\omega) \tag{9B.7}$$

附录 9C　式 (9.7.9) 的证明

设 $U=\exp(\mathrm{i}\Omega)$, 因

$$U(\underline{x}_1,\cdots,\underline{x}_i,\cdots,\underline{x}_j,\cdots,\underline{x}_N)$$

$$=\exp\left\{\mathrm{i}\frac{\theta}{\pi}\left[\sum_{n<l(\neq i,j)}^{N}\alpha_{nl}+\sum_{l=i+1(l\neq j)}^{N}\alpha_{il}+\sum_{n=1}^{i-1}\alpha_{ni}+\sum_{l=j+1}^{N}\alpha_{jl}+\sum_{n=1(n\neq i)}^{j-1}\alpha_{nj}+\alpha_{ij}\right]\right\}$$

故

$$\Delta\Omega_{ij}\equiv\Omega(\underline{x}_1,\cdots,\underline{x}_j,\cdots,\underline{x}_i,\cdots,\underline{x}_N)-\Omega(\underline{x}_1,\cdots,\underline{x}_i,\cdots,\underline{x}_j,\cdots,\underline{x}_N)$$

$$=\frac{\theta}{\pi}\sum_{n=i+1}^{j-1}(\alpha_{jn}+\alpha_{ni}-\alpha_{nj}-\alpha_{in})+\frac{\theta}{\pi}(\alpha_{ji}-\alpha_{ij})$$

但根据 α_{ij} 的几何意义可知 $\alpha_{ji}-\alpha_{ij}=\pm\pi$, 所以 $\Delta\Omega_{ij}$ 只能等于如下三种值之一：$(j-i-1)2\theta\pm\theta,\pm\theta,-(j-i-1)2\theta\pm\theta$. 所以当 θ 等于 π 的整倍数时, 则有

$$U^{-1}(\underline{x}_1,\cdots,\underline{x}_j,\cdots,\underline{x}_i,\cdots,\underline{x}_N)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Delta\Omega_{ij}}U^{-1}(\underline{x}_1,\cdots,\underline{x}_i,\cdots,\underline{x}_j,\cdots,\underline{x}_N)$$

$$=\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\theta}U^{-1}(\underline{x}_1,\cdots,\underline{x}_i,\cdots,\underline{x}_j,\cdots,\underline{x}_N)$$

附录 9D　式 (9.7.13) 的证明

注意到式 (9.7.10) 中令 $|\underline{x}|=r$, 则 $\underline{e}_\beta$ 是二维极坐标系 (r,β) 中的两个单位矢量 $(\underline{e}_r,\underline{e}_\beta)$ 中的一个. 因此对于围绕原点的任何围道 C, 都有

$$\oint_C\underline{\mathfrak{A}}(\underline{x})\cdot\mathrm{d}\underline{x}=\frac{\theta}{e\pi}\int_0^{2\pi}r\mathrm{d}\beta\frac{1}{r}=\frac{2\theta}{e}\tag{9D.1}$$

再由二维斯托克斯公式得

$$\oint_C\underline{\mathfrak{A}}(x)\cdot\mathrm{d}\underline{x}=\int\mathrm{d}x\mathrm{d}y\underline{e}_z\cdot\boldsymbol{\nabla}\times\mathfrak{A}(\underline{x})=\frac{2\theta}{e}\tag{9D.2}$$

所以

$$\boldsymbol{\nabla}\times\underline{\mathfrak{A}}(\underline{x})=\frac{2\theta}{e}\delta(x)\delta(y)\underline{e}_z\tag{9D.3}$$

又因 $\delta(x)\delta(y)\equiv\delta(\underline{x})$, 故

$$b(\underline{x})\underline{e}_z=\boldsymbol{\nabla}\times\underline{a}(\underline{x})=\sum_i\boldsymbol{\nabla}\times\underline{\mathfrak{A}}(\underline{x}-\underline{x}_i)=\frac{2\theta}{e}\sum_i\delta(\underline{x}-\underline{x}_i)\underline{e}_z$$

若令 $\phi_0=2\pi/e$, 则由上式就得出式 (9.7.13).

参 考 文 献

阿布里科索夫, 戈尔可夫, 加洛辛斯基. 1963. 统计物理学中的量子场论方法. 北京: 科学出版社.

李正中. 2002. 固体理论. 2 版. 北京: 高等教育出版社.

卫崇德, 章力源, 刘福绥. 1992. 固体物理中的格林函数方法. 北京：高等教育出版社.

Altland A, Simons B. 2006. Condensed Matter Field Theory. 北京：世界图书出版公司.

Callaway J. 1991. Quantum Theory of Solid State. 2nd Edition. New York: Academic Press.

Mahan G D. 2000. Many-Particle Physics. 北京: 世界图书出版公司.

Negele J W, Orland H. 1988. Quantum Many-Particle Systems. Addison-Wesley Publishing Company.

Peskin M E, Schroeder D V. 1995. An Introduction to Quantum Field Theory. Addison-Wesley Publishing Company.

索　　引

B

C

D

其他

《现代物理基础丛书》已出版书目

(按出版时间排序)

1. 现代声学理论基础	马大猷 著	2004.03
2. 物理学家用微分几何 (第二版)	侯伯元, 侯伯宇 著	2004.08
3. 数学物理方程及其近似方法	程建春 编著	2004.08
4. 计算物理学	马文淦 编著	2005.05
5. 相互作用的规范理论 (第二版)	戴元本 著	2005.07
6. 理论力学	张建树, 等 编著	2005.08
7. 微分几何入门与广义相对论 (上册 · 第二版)	梁灿彬, 周彬 著	2006.01
8. 物理学中的群论 (第二版)	马中骐 著	2006.02
9. 辐射和光场的量子统计	曹昌祺 著	2006.03
10. 实验物理中的概率和统计 (第二版)	朱永生 著	2006.04
11. 声学理论与工程应用	朱海潮, 等 编著	2006.05
12. 高等原子分子物理学 (第二版)	徐克尊 著	2006.08
13. 大气声学 (第二版)	杨训仁, 陈宇 著	2007.06
14. 输运理论 (第二版)	黄祖洽 著	2008.01
15. 量子统计力学 (第二版)	张先蔚 编著	2008.02
16. 凝聚态物理的格林函数理论	王怀玉 著	2008.05
17. 激光光散射谱学	张明生 著	2008.05
18. 量子非阿贝尔规范场论	曹昌祺 著	2008.07
19. 狭义相对论 (第二版)	刘 辽, 等 编著	2008.07
20. 经典黑洞与量子黑洞	王永久 著	2008.08
21. 路径积分与量子物理导引	侯伯元, 等 著	2008.09
22. 量子光学导论	谭维翰 著	2009.01
23. 全息干涉计量——原理和方法	熊秉衡, 李俊昌 编著	2009.01
24. 实验数据多元统计分析	朱永生 编著	2009.02
25. 微分几何入门与广义相对论(中册 · 第二版)	梁灿彬, 周彬 著	2009.03

26. 中子引发轻核反应的统计理论　张竞上 著　2009.03
27. 工程电磁理论　张善杰 著　2009.08
28. 微分几何入门与广义相对论(下册 · 第二版)　梁灿彬, 周彬 著　2009.08
29. 经典电动力学　曹昌祺 著　2009.08
30. 经典宇宙和量子宇宙　王永久 著　2010.04
31. 高等结构动力学(第二版)　李东旭 著　2010.09
32. 粉末衍射法测定晶体结构(第二版 · 上、下册)　梁敬魁 编著　2011.03
33. 量子计算与量子信息原理　Giuliano Benenti 等 著
　——第一卷：基本概念　王文阁, 李保文 译　2011.03
34. 近代晶体学(第二版)　张克从 著　2011.05
35. 引力理论(上、下册)　王永久 著　2011.06
36. 低温等离子体　B. M. 弗尔曼, И. M. 扎什京 编著
　——等离子体的产生、工艺、问题及前景　邱励俭 译　2011.06
37. 量子物理新进展　梁九卿, 韦联福 著　2011.08
38. 电磁波理论　葛德彪, 魏 兵 著　2011.08
39. 激光光谱学　W. 戴姆特瑞德 著
　——第 1 卷：基础理论　姬 扬 译　2012.02
40. 激光光谱学　W. 戴姆特瑞德 著
　——第 2 卷：实验技术　姬 扬 译　2012.03
41. 量子光学导论(第二版)　谭维翰 著　2012.05
42. 中子衍射技术及其应用　姜传海, 杨传铮 编著　2012.06
43. 凝聚态、电磁学和引力中的多值场论　H. 克莱纳特 著
　姜 颖 译　2012.06
44. 反常统计动力学导论　包景东 著　2012.06
45. 实验数据分析(上册)　朱永生 著　2012.06
46. 实验数据分析(下册)　朱永生 著　2012.06
47. 有机固体物理　解士杰, 等 著　2012.09
48. 磁性物理　金汉民 著　2013.01
49. 自旋电子学　翟宏如, 等 编著　2013.01

50.	同步辐射光源及其应用(上册)	麦振洪, 等　著	2013.03
51.	同步辐射光源及其应用(下册)	麦振洪, 等　著	2013.03
52.	高等量子力学	汪克林　著	2013.03
53.	量子多体理论与运动模式动力学	王顺金　著	2013.03
54.	薄膜生长（第二版）	吴自勤，等　著	2013.03
55.	物理学中的数学物理方法	王怀玉　著	2013.03
56.	物理学前沿——问题与基础	王顺金　著	2013.06
57.	弯曲时空量子场论与量子宇宙学	刘　辽，黄超光　著	2013.10
58.	经典电动力学	张锡珍，张焕乔　著	2013.10
59.	内应力衍射分析	姜传海，杨传铮　编著	2013.11
60.	宇宙学基本原理	龚云贵　著	2013.11
61.	B 介子物理学	肖振军　著	2013.11
62.	量子场论与重整化导论	石康杰，等　编著	2014.06
63.	粒子物理导论	杜东生，杨茂志　著	2015.01
64.	**固体量子场论**	**史俊杰，等　著**	**2015.03**

(O-5881.01)

科学数理分社
电话：010-64017957
Email：qianjun@mail.sciencep.com

销售分类建议：高等物理

www.sciencep.com



定 价：158.00 元